

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7月5-8日, 2025

福建 厦门

B01-光催化材料
B01-Photocatalytic Materials

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



B01. 光催化材料分会

分会主席：李朝升 郝维昌 叶金花 涂文广 邹志刚

B01 -01

氮化碳光电化学转换与传感应用

张袁健*

东南大学

纳米碳材料由于丰富的成键方式、独特的几何结构和优异的性能，在材料、化学、生命等领域获得了许多重要应用。进一步元素掺杂，特别是 N 元素的引入，碳材料的电子结构和表面性质会发生巨大的改变。例如，C 和 N 共价连接的石墨相氮化碳相比于石墨烯由于带隙被打开，因而被用作新一代无金属半导体光催化剂用于水分解制氢和生物友好的光电化学转化探针。我们的前期工作发现氮化碳具有光电化学转换性能，通过 π 键重组等结构调控手段可使其阴极电化学发光效率在无金属探针当中处于最高值。因此，氮化碳在光电分析化学领域具有广阔的应用前景，有望将其发展成为其继小分子和纳米型发光体之后的第三代共轭聚合物型发光体；此外，我们课题组最近也开展了氮化碳光催化过氧化氢合成和肿瘤治疗的初步研究。

B01 -02

TiO₂ 纳米阵列同质结构建及其光电化学性能提升

林仕伟*、张浩然

海南大学

金属氧化物半导体，例如 TiO₂ 和 ZnO 等，不仅具有稳定性好、环境友好、廉价等特点，并且容易通过优化工艺条件，制备成一维纳米阵列结构，包括纳米线、纳米棒和纳米管等。一维纳米阵列可为光生载流子的有效分离和快速传输提供便捷路径，是理想的光电催化电极结构。但是，氧化物光电极往往具有禁带宽度大、光生电荷量子效率低等缺点。因此，采取合适的结构优化措施提高光电催化性能就显得十分关键。除了利用窄禁带半导体，比如 CdS、CdSe 和 PbS 等，敏化金属氧化物纳米阵列外，在氧化物纳米阵列内部构建同质结，引入梯度能级/内建电场促进光生载流子的分离和转移，也被认为是一种提高光电催化性能的重要优化策略。本报告介绍近期开展的两个工作，说明在纳米阵列结构中构建同质结优化光电催化性能的有效性，依次包括在 TiO₂ 纳米管阵列中通过热处理构筑同质锐钛矿/金红石相结、在水热法生长 TiO₂ 纳米棒阵列过程中调控 Ti³⁺ 自掺杂浓度引入梯度能级）增强内建电场等。这些结果表明在纳米阵列内部构建同质结，能够极大改善光生载流子转移和传输性能，是开发和优化光电催化性能的重要方法。

B01 -03

混合微波退火合成高效氧化铁光阳极

张和民*

四川大学

摘要：太阳能光电催化分解水制氢、还原硝酸盐/氮气制氨或将二氧化碳转化为碳氢燃料等可有效缓解人类对可再生能源的需求，是实现“碳中和、碳达峰”的理想途径。目前还没有一种光电材料能够满足所有的条件（高效、稳定、价廉）。探索新材料、新结构、以及新的制备技术是实现太阳能高效转换和利用的关键。在导电玻璃基底上制备同时具有纳米结构和高结晶性的光电极材料仍然是一个很大的挑战[1]。一方面，高结晶性可以减少晶界和缺陷，有利于光生电子/空穴的分离、传输；另一方面，纳米结构化增大了电解液的接触面积，同时缩短了光生电子/空穴的传输距离。然而，高结晶性材料需要长时间的高温退火合成，通常会造成纳米结构的破坏。

混合微波退火（Hybrid microwave annealing, HMA）有效耦合了常规加热和微波加热，是一种独特高效的加热方法。我们发展了 HMA 在光电催化方面的多个应用：1）“HMA 诱导固相界面反应”构筑了合成条件苛刻的氧化铁新型异质结材料，增强了光电催化性能[2, 3]；2）“HMA 合成梯度掺杂芯-壳同质结”的光电极，发挥掺杂优势的同时解决了过多表面缺陷和更高过电位的问题[4]；3）HMA 高效修复/激活氮离子植入的二氧化钛电极，提高了光电催化性能[5]；4）基于原位掺杂和 HMA 诱导固相界面反应构筑高结晶性 p-t-n 异质结，有效提升氧化铁分解水性能[6]；5）HMA 在 α -Fe₂O₃ 纳米棒表面合成了非晶 HfOx 的空穴存

储层[7]; 7) HMA 诱导稀土 Eu、过渡金属 Nb 共掺杂赤铁矿光阳极, 提升光电流密度的同时降低起始电位[8]; 8) HMA 诱导 Sb 掺杂氧化铁 p-n 同质结叠层光阳极实现其近理论转化效率[9]; 9) HMA 诱导氧化锆覆盖层与氧化铌阻挡层, 合成了多孔氧化铁纳米棒光阳极[10]。HMA 为高效光电极材料的制备、异/同质结的构筑和新型半导体材料的合成提供了新的技术平台。

关键词: 高性能光电极, 混合微波退火, 太阳能光电化学分解水, 异/同质结

参考文献

- [1] Zhang H, et al. Acc. Chem. Res. 2019, 52, 3132.
- [2] Zhang H, et al. Adv. Funct. Mater. 2019, 29, 1805737.
- [3] Zhang H, et al. ACS Catal. 2019, 9, 1289.
- [4] Zhang H, et al. Nat. Commun. 2020, 11, 4622.
- [5] Zhang H*, et al. J. Phys. Chem. Lett. 2022, 13, 3878.
- [6] Zhang H*, et al. ACS Catal. 2023, 13, 7002.
- [7] Zhang H*, et al. Appl. Catal. B 2024, 342, 123465.
- [8] Zhang H*, et al. J. Mater. Chem. A 2024, 12, 11831.
- [9] Zhang H*, et al. Nat. Commun. 2024, 15, 9712.
- [10] Zhang H*, et al. Small. 2025 (DOI:10.1002/sml.202502503).

B01 -04

新型宽光谱响应光阳极材料氧空位缺陷调控

雷帆, 刘化云, 张德云, 李仁贵, 周虹鹏*

湖南师范大学 长沙, 410081

*邮箱 hpzhou@hunnu.edu.cn 电话 17725162146

光电催化水分解制氢是太阳能转换利用的潜在途径。然而大部分光阳极材料因为材料体相、表面和晶界缺陷的存在导致电荷分离效率低下, 本文以新型宽光谱响应 PbCrO_4 材料为研究模型 1, 首先提出通过引入热稳定性差异化的聚乙二醇-铅配体和乙酰丙酮-铬配体延缓热解成核-晶化过程来提高 PbCrO_4 的结晶度, 同时长链聚乙二醇配位分子可以作为成核模版增加成核密度, 消除孔洞缺陷和增加晶粒尺寸, 双配体的引入有效的降低体相、表面和晶界的氧缺陷密度并将电荷分离效率从 47% 提高到 90%; 进一步通过控制退火氧化化学势精细调控不同晶格位置氧缺陷浓度比例 2, 利用变温光谱、波长调制空间分辨表面光电压谱揭示深能级氧晶格位置缺陷浓度的增加可以通过界面钉扎效应提升表面光电压以及引入低价 Cr^{n+} ($3 < n < 6$) 小幅提升电荷分离效率和大幅提升表面电荷注入效率, 最后我们通过引入 CoPi/Pt/PbCrO_4 多层界面钝化结构调制表面深能级氧空位缺陷态, 部分消除界面缺陷态钉扎的影响, 将 ABPE 提升至该材料当前纪录值 1.12%。最后指出 CrO_n 配位多面体的晶格氧缺陷调制是影响该材料电荷分离和长期稳定性的关键 1-5。

参考文献

- [1] H. Zhou, D. Zhang, X. Gong, F. Fan, R. Li* and C. Li* et al., Adv. Mater., 2022, 34, 2110610.
- [2] H. Zhou, D. Zhang, F. Fan, R. Li* and C. Li* et al., Adv. Mater., 2023, 2300914.
- [3] W. Jiang, C. Ni, X. Wang, C. Li* and R. Li* et al., Angew. Chem., Int. Ed., 2022, 61, e202207161.
- [4] Y. Deng#, H. Zhou#, S. Yang, R. Li* and C. Li* et al., Small, 2022, 18, 2103245.
- [5] Y. Liu#, H. Zhou#, Y. Ni, J. Guo, R. Lu, C. Li* and X. Guo*, Joule, 2023, 03, 010.

B01 -05

高稳定性光电催化海水分解与表面腐蚀研究

刘昌昊、冯建勇、邹志刚、李朝升*

南京大学

光电催化海水分解是一条具有发展前景的绿氢生产路径, 但是其面临着严重的海水腐蚀问题。我们揭示了在光电化学海水分解的过程中光阳极表面的腐蚀与失活的机理。在反应过程中表面过度的羟基化打破

了原本致密的 Fe-O 配位网络,使得表面结构趋于疏松。此外表面晶格氧的流失和 Cl 离子的渗透与强配位加剧了腐蚀的过程。随着反应的不进行,表面发生大量的金属流失,最终导致光阳极的腐蚀与失活。在 β -Fe₂O₃ 中掺杂原子级分散的 Sn 可以在晶格中起到锚定的作用,一方面阻碍了质子向晶格氧的传递,由于强 M-O 键的存在,表面羟基化的程度下降。另一方面抑制了 M-O 键的断裂,削弱了 Cl⁻ 的渗透与配位,抵抗海水的腐蚀。通过增强金属-氧相互作用策略改性的光阳极在稳定海水分解 3000 小时后光电流密度仍没有明显的衰减。本研究为改善能源转换中光电极长期耐久性问题提供了新的见解。

B01-06

金属/MOFs 复合光催化剂的微结构调控及应用

孙登荣*

四川大学

光催化是实现太阳能到化学能转化的有效途径之一。金属有机框架(MOFs)材料是一类由金属和有机配体连接形成的多孔晶态材料,不仅具有类半导体性质,而且具有组成结构精确且易调变的特点,成为近年来兴起的明星光催化材料。将 MOFs 与其他功能材料如金属纳米颗粒复合可以实现二者的协同效应。我们围绕构建金属/MOFs 复合光催化体系开展了一系列研究工作。通过调控金属与 MOFs 的组装结构、空间布局等策略,构筑了一系列金属/MOFs 复合材料如孔道限域的金属@MOFs、金属/MOFs/COFs、三明治结构的 MOFs@金属@COFs 等。通过调控金属/MOFs 组装结构,优化反应过程中的电荷迁移效率和传质扩散,实现高效的光催化性能。研究结果对设计高性能的光催化材料具有一定的指导意义。

B01-07

临近碳缺陷调控钴单原子的电子结构促进苯甲醇光热催化氧化

欧阳述昕^{1,2*}, 罗小利^{1,2}, 魏伟钦³

1. 华中师范大学化学学院

2. 光能利用与减污降碳教育部工程研究中心

3. 北京大学化学与分子工程学院

通讯作者邮箱: oysx@mail.ccnu.edu.cn

利用太阳光及催化剂驱动化学反应是一种绿色、可持续的方法。光热催化是催化剂将光能转化为热能进而驱动催化反应的过程,与基于光电转换机制的半导体光催化成为光催化的两大重要研究方向,各具优势。无论是光热催化还是半导体光催化,其核心是催化剂,而催化剂的性能提升主要聚焦于活性位点的调控。具体来说,活性位点的浓度和电子结构影响催化剂整体的反应活性。本课题组以 In₂O₃ 为模型催化剂,详细研究了氧空位活性位点浓度及电子结构调控对二氧化碳光热催化加氢性能的影响¹⁻³。碳基材料上锚定单原子成为热催化、电催化的热点催化剂,碳基底上存在丰富的碳缺陷,可影响金属中心的电子结构,进而对催化活性产生影响。本研究以 Co 单原子锚定在碳基底为模型催化剂,通过合成工艺调控了 Co 单原子临近的碳缺陷,从而精确控制 Co 单原子位点上自旋电子数,实现了对 O₂ 的吸附及活化的增强效应,因而促进了苯甲醇分子的催化氧化⁴。

参考文献

1. Qi Y., Ouyang S. et al., Adv. Mater, 2020, 32, 1903915.
2. Qi Y., Ouyang S., Mi W. et al., Adv. Funct. Mater, 2021, 31, 2100908.
3. Wei W., Ouyang S. et al., Nat. Commun., 2022, 13, 3199.
4. Luo X., Liu Z., Ouyang S., Zhang T. et al., Angew. Chem.-Int. Ed., 2025, DOI10.1002/anie.202502430.

B01-08

光驱动 C1-2 分子催化转化

汪思波*

福州大学

利用光催化技术实现 CO₂、甲烷、乙烷等碳基小分子的增值转化具有重要的研究意义[1-4]，但目前相关反应（如 CO₂ 还原，甲烷干重整，乙烷脱氢制乙烯）的效率和选择性还远低于实际应用的需求。鉴于此，我们开展了以下两方面工作：

1. 通过在 TiN、PTI、PHI 等光催化剂表面精准修改催化活性位点，强化 CO₂ 的活化，稳定反应中间体，加速产物脱附，实现高效的光催化 CO₂ 还原耦合 H₂O 氧化制合成气[5,6]。

2. 通过阳离子缺陷工程、金属位点部分取代等策略，调控金属氧化物催化剂的电子结构，弱化 M-O 键，活化晶格氧，显著提升 MvK 机制介导的光热催化甲烷干重整、光催化乙烷脱氢制乙烯等反应效率[7]。

参考文献

- [1] S. Wang, et al. J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 17305-17308.
- [2] S. Wang, et al. Energy Environ. Sci. 2018, 11, 306-310.
- [3] S. Wang, et al. J. Am. Chem. Soc. 2018, 140, 5037-5040.
- [4] S. Wang*, et al. Adv. Energy Mater. 2023, 13, 2203290.
- [5] S. Wang*, et al. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 27415-27423.
- [6] S. Wang*, et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2025, e202505453.
- [7] S. Wang*, et al. J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 14705-14714.

B01-09

水分解制氢过程研究

刘乐全*

天津大学

水裂解是水分解制氢和水作为还原剂参与其它加氢过程的关键步骤。以 CO₂RR，水作为它的质子源，其较高的裂解能垒会严重降低 CO₂RR 的活性，而这一点在现有的研究中通常被忽略。在近期的工作中，我们通过缺陷工程，提高水裂解能力，从而实现了 2.8 mmol h⁻¹ 甲酸生成速率（法拉第效率大于 90%）。动力学实验和 DFT 研究表明水裂解在 CO₂ 还原的反应速率中发挥了至关重要的作用。氧空位的引入加强了对羟基的吸附，从而降低了水裂解的能垒。

PEM 被认为是 PV-EC 的未来技术，其面临的挑战是过渡依赖铱和强酸性条件下的稳定性问题。我们在这方面做了一些尝试，报道了低铱含量和高电流密度下的 OER 催化剂。

直接利用光能的光催化水分解技术在制备清洁能源方面潜力巨大。然而，其面临着表面反应动力学缓慢和氢氧逆反应等诸多挑战。

在我们近期的工作中，一方面通过卤素表面修饰策略显著提升了钒酸铋光催化水氧化性能，在 420 nm 光照下，表观量子效率(AQE)达 34.6%，是目前公开报道中该材料最高的 AQE 之一。一系列研究表明，氯修饰能够明显降低水氧化所需的能垒并可能伴随着反应路径的改变，同时促进水分子活化，显著加快了水氧化的反应动力学。类似的策略还被发现可以有效调控 C3N4N 中缺陷类型的选择和浓度的连续调控 N 空位的浓度。其次，铂、钨和铈等金属作为常用的产氢助催化剂却很容易催化氢气与氧气生成水的逆反应。我们在本组过往工作的基础上开发了一种在金属助催化剂上选择性包覆单层石墨烯来显著抑制逆反应的新型方法。研究证明单层石墨烯有效阻隔了外部氧气与被包覆金属的接触，而逆反应在单层石墨烯包覆层表面也很难进行。以上工作为开发高效光催化水分解材料提供了有益借鉴和新思路。

参考文献

- [1] X. Chen, J. Chen, H. Chen, Q. Zhang, J. Li, J. Cui, Y. Sun, D. Wang, J. Ye and L. Liu, Nat. Commun., 2023, 14, 751.
- [2] Q. Zhang, M. Liu, W. Zhou, Y. Zhang, W. Hao, Y. Kuang, H. Liu, D. Wang, L. Liu and J. Ye, Nano Energy,

2021, 81, 105651.

[3] X. Yang, J. Cui, X. Liu, Q. Zhang, D. Wang, J. Ye and L. Liu, Appl. Catal., B, 2023, 325, 122369.

[4] X.L. Liu, X.M. Yang, J.W. Cui, C.H. Wu, Y.H. Sun, X.M. Du, J.X. Chen, J.H. Ye, L.Q. Liu, ACS Catal., 13 (2023) 14314-14323.

B01-10

高效非金属等离子激元光催化材料构建

姜在祝*

暨南大学

表面等离子体共振效应 (SPR) 是贵金属材料具有的独特光学性质, 其在增强拉曼散射光谱、化学生物检测、光电探测等领域具有重要的应用。强 SPR 效应可产生高活性热电子在光催化分解水、有机合成、二氧化碳还原等领域有着重要的应用。贵金属的高昂价格和稀有性制约着金属 SPR 光催化剂的应用, 而探索制备具有 SPR 效应的半导体等非金属光催化剂成为理想选择。但非金属 SPR 光催化剂存在载流子浓度低、SPR 效应不稳定的难题, 为此我们课题组提出了一系列的解决途径, 并构建了 $\text{TiO}_2/\text{WO}_{3-x}$, $\text{CdS}/\text{WO}_{3-x}$, $\text{BP}/\text{WO}_{3-x}$ and $\text{MoS}_2/\text{MoO}_{3-x}$ 等复合非金属 SPR 光催化剂, 证明了电子的持续注入可有效提升 SPR 催化效率, 同时验证了其在光催化分解水及二氧化碳还原中具有稳定活性。此外, 我们探索半导体中构建 SPR 效应的有效途径, 提出了富电子能级构造诱导半导体 SPR 效应的研究思路, 并通过在 Bi_2WO_6 中构建多种氧缺陷, 证明了与钨原子相连的氧缺陷可产生储电子能级, 实现载流子富集, 诱导 Bi_2WO_6 产生 SPR 效应, 并发现其 SPR 效应在光催化二氧化碳还原产甲烷中具有决定性作用。为厘清非金属 SPR 热电子与光热效应对增强催化反应的具体协同贡献, 我们课题组设计合成了非金属 SPR 复合光催化剂 $\text{WO}_{3-x}/\text{还原氧化石墨烯 (rGO)}$, rGO 包覆在 WO_{3-x} 表面稳定了氧缺陷, 证明了热电子在增强光催化中的决定性作用, 揭示了热电子可加速异丙醇 C-O 键断裂降低异丙醇脱水反应活化能 (低至 0.37 eV) 的增强催化机制, 在全光谱光激发下实现了高选择性 (100%) 和高效光催化异丙醇脱水产丙烯 (437.5 mmol/g/h), 催化反应速率提升 180 倍。

参考文献

[1] D. H. Tian, Z. Z. Lou* et al., Adv. Mater., 2024, 36, 2404738.

[2] B. Li, Z. Z. Lou,* Z. K. Zheng,* et al., ACS Nano, 2024, 18, 25522.

[3] C. H. Lu, Z. Z. Lou,* et al., Nature Comm., 2022, 13, 6984.

[4] C. H. Lu, Z. Z. Lou,* et al., ACS Nano, 2021, 15, 3529-3539.

[5] X. L. Liu, Z. Z. Lou,* et al., Mater. Horiz., 2024, 11, 5470-5498.

B01-11

负载型光热催化剂的设计及其 CO_2 还原性能研究

陈勇*、任浩、张程林、袁昊阳、张静

南京理工大学

光热催化是一种新型耦合技术, 能同时解决热催化能耗高和光催化效率低的问题, 是实现 CO_2 在较为温和条件下高效转化为碳氢燃料或工业原料的有效途径^[1]。优异的光热催化剂应该同时满足以下条件: 高效光热吸收单元、丰富的催化活性位点和适当热管理。而单一组分的催化剂很难同时满足上述要求。因此, 常见的光热催化剂通常为金属-载体负载型催化剂。选择何种组分作为催化中心和载体, 以及如何制备这种负载型催化剂, 增加金属和载体之间的界面接触, 实现各组分之间的功能协同增强, 是影响光热催化剂活性和稳定性的重要因素。

V 价态可变 (从+2 到+5), 导致过渡金属钒酸盐有多种不同化学计量比的结构^[2,3]。首选, 以前期工作中优化后 $\text{Ni}_2\text{V}_2\text{O}_7$ 为原料, 设计了一种全太阳光谱吸收的微量 Ru 负载的偏钒酸镍催化剂 ($0.35\%\text{Ru}@\text{Ni}_2\text{V}_2\text{O}_7$), 其能够耦合光催化/光热催化实现光驱动的高效 Sabatier 反应, 甲烷产出速率约为 $32.8 \text{ mol g}_{\text{Ru}}^{-1} \text{ h}^{-1}$, 该活性为当时光驱动下 Ru 基催化剂的最高值^[4]。随后, 以 $\text{Ni}_2\text{V}_2\text{O}_7$ 为前驱体, 通过原

位相分离法，合成了原位生成的金属 Ni 纳米颗粒负载的 VN (Ni/VN) 复合催化剂，该催化剂通过金属-半导体 LSPR 协同效应实现了 200-2500 nm 全光谱响应，能够将光能转化热能驱动 CO₂ 氢化反应^[5]。其中 Ni 负责活化 H₂，金属 Ni 和载体 VN 之间的电子金属-载体相互作用，有利于吸附和活化 CO₂，同时，增加对 CO*中间体的吸附，以上这些优势促使所合成的最优催化剂在不使用任何外加热源的氙灯照射下，CH₄ 平均产率和选择性分别高达 89.4 mmol g_{cat}⁻¹h⁻¹ 和 99%，其性能显著优于传统沉积法制备的 Ni/VN-w 催化剂及商用 Ni@Al₂O₃-SiO₂ 催化剂。其次，以 Ni₃V₂O₈ 为前驱体，通过氢化还原，制备了原位 V₂O₃/Ni 反相催化剂，该催化剂具有良好的紫外-可见-红外光吸收能力，能够将光能转化热能驱动 CO₂ 加氢生成甲烷^[6]。该研究为金属负载型光热催化剂的精准设计提供了新思路，对碳减排技术发展具有重要指导意义。

参考文献

- [1] Y. Chen, Z.Y. Yue, S.W. Tsang, Y. H. Cheng, *Nano Energy*, **2025**, 137, 110782.
- [2] Y. Chen, Y. Zhang, W. Wang, X. Xu, Y. Li, M. Du, Z. Li and Z. Zou, *Solar RRL*, **2022**, 6, 2200099.
- [3] M. Du, Y. Chen, W. Wang, X. Xu, Y. Li, Y. Zhang, Z. Li and Z. Zou, *Appl. Catal. B: Environ.*, **2022**, 317, 121722.
- [4] Y. Chen, Y. Zhang, G. Fan, L. Song, G. Jia, H. Huang, S. Ouyang, J. Ye, Z. Li and Z. Zou, *Joule*, **2021**, 5, 3235.
- [5] Y. Chen, G. Fan, X. Xu, Y. Zhang, Y. Li, Z. Li and Z. Zou, *Adv. Funct. Mater.*, **2025**, 2500357.
- [6] Y. Chen, C. Zhang, H. Ren, H. Yuan, Z. Li and J. Zhang, In-situ synthesized V₂O₃/Ni inverse catalyst for photothermal catalytic CO₂ methanation. (unpublished)

B01-12

低碳烷烃分子选择活化

徐勇*

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

随着日益严峻的能源与环境危机，开发绿色非石油基化学品合成路线具有重要的意义。近年来，随着页岩气（主要成分为甲烷、乙烷、丙烷等低碳烷烃）勘探和开采技术的不断突破，人类已探明的页岩气储量超过 200 万亿立方米，我国储量位居世界第一位，为化学品合成提供了丰富而廉价的原料。因此开发以低碳烷烃为原料的化学品合成路线是缓解当前能源危机、促进双碳重大战略计划实现的必要途径。然而，由于碳氢键键能较大，低碳烷烃催化转化需要在高温条件下进行。高温不仅造成能源浪费，而且对催化剂的稳定性也提出了更高要求。为此，我们围绕低碳烷烃选择活化，通过催化剂开发，耦合传统热催化与光催化体系，开发绿色低碳烷烃氧化技术，助力双碳重大战略计划实现。

B01-13

光生载流子同步高效利用：光催化制氢及增值氧化机理

唐沅*

河北大学物理学院

传统光催化制氢体系受限于牺牲剂的单向消耗机制，光生电子-空穴对仅有约 50%被用于析氢反应，这种非对称载流子利用模式导致太阳能转化效率难以实现本质的突破。利用有机化合物替代传统牺牲剂作为空穴捕获剂，通过定向调控氧化中间体与反应路径，理论上可实现光生电子-空穴的高值化利用，同步驱动光热催化制氢与选择性有机氧化。报告人以 CdS 为模型，通过结构调控和界面设计优化载流子分离与利用，探究其制氢与合成高附加值化学品的协同机制：（1）利用 1T-WS₂ 的金属特性与 S 空位协同作用，通过光热效应增强光吸收与晶格热振动，加速 CdS 至空位的电子迁移，提升制氢动力学。（2）开发 Pt-CdS_x-T 同质结体系，通过 Pt-S 键锚定 Pt 亚纳米团簇于 CdS 表面，配位不饱和 S 原子促进界面电子定向转移，实现载流子高效利用。（3）设计 Pd 单原子负载的 CdS 孪晶结构，Pd 单原子稳定晶格并优化乳酸吸附位点，同步驱动光生电子产氢与空穴催化乳酸氧化生成丙酮酸。（4）构筑 CdS 纳米笼增强光热效应，空心结构强化 Cd 位点对糠醇的吸附，增强的光热效应促进热电子注入与局域电解质加热，协同提升制氢效率与糠醛

合成速率。

B01-14

微纳光催化材料的梯度设计

曹少文*

武汉理工大学材料复合新技术全国重点实验室, 武汉, 430070

电邮地址: swcao@whut.edu.cn

摘要:将太阳能通过人工光合作用转化为高附加值产物被认为是缓解化石燃料过度消耗这一问题的有效策略。开发低成本、可持续且高活性的光催化剂对提升实际应用中的太阳能-化学能转换效率至关重要。从原子和分子层面调控材料结构, 建立有序内建电场以加速光生电子-空穴对的分离, 是实现高效光催化体系的关键。本次汇报系统介绍面向不同应用的多类型光催化体系梯度化设计: (1) 通过单体调控构建供体-受体聚合物体系, 借助内建电场形成定向电荷传输通道, 显著提升 H₂O₂ 光合成效率; (2) 基于全域空间电荷分离的逻辑框架, 精准构筑超晶格界面与 S 型异质结, 在内建电场介导下实现界面协同作用, 成功达成超快空间电荷分离与转移, 实现高效光催化产氢; (3) 通过静电吸附-原位生长策略构建聚合物/量子点二维/零维体系, 形成界面电场促进跨界面电荷转移, 显著增强光催化产氢性能。

关键词: 光催化材料 • 结构调控 • 界面设计 • 电荷转移

[1] S. Wan, W. Wang, B. Cheng, G. Luo, Q. Shen, J. Yu*, J. Zhang*, S. Cao*, L. Zhang, *Nat. Commun.*, **2024**, 15: 9612.

[2] J. Cheng, W. Wang, J. Zhang, S. Wan, B. Cheng, J. Yu, S. Cao*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, **63**: e202406310.

[3] J. Cheng, S. Wan, S. Cao*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2023**, **62**: e202310476.

[4] C. Yang, S. Wan, B. Zhu, J. Yu, S. Cao*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, **61**: e202208438.

[5] C. Cheng, B. He, J. Fan, B. Cheng, S. Cao*, J. Yu*, *Adv. Mater.*, **2021**, **33**: 2100317.

B01-15

氮化碳结构调控增强光催化选择性有机合成

成佳佳*

福州大学

氮化碳聚合物半导体光催化剂具有高可见光响应、结构易调控、性能稳定、廉价易得等优点, 在光催化有机合成、水分解、二氧化碳还原以及环境净化中表现出良好的应用前景。然而传统的氮化碳材料常为无定形态, 光生载流子复合严重, 光催化效率较低。如何有效提高其聚合度和结构有序度、改善光吸收、促进光生电荷的分离和迁移、促进表界面反应动力学过程, 是制约氮化碳高效高选择性光催化有机合成研究的一个关键问题。围绕这一问题, 我们通过调控前驱体的聚合程度, 利用熔盐法制备了不同聚合度和结晶度的氮化碳聚合物, 深入探讨结晶度与光生电子迁移以及反应活性物种生成的关系, 研究了其对光催化分子氧活化过程的影响; 通过一种温和的方式对七嗪基高结晶度氮化碳聚合物进行了局部缺陷化处理和表面改性, 在保持其高结晶度的同时成功扩展其可见光吸收, 提高了氮化碳光催化有机化合物转化制备高附加值化学品反应的效率及选择性。

B01-16

钛酸锶基半导体材料在光解全水反应下的瓶颈及进展

常焜*

南京航空航天大学

近年来, 太阳能驱动水分解技术主要发展出三种技术路径: 光催化、光电催化和光伏-电催化。其中, 颗粒型光催化系统由于具有成本低廉、耐久性高和操作简便等优势, 受到广泛关注。然而仍存在一些挑战, 例如半导体催化剂中载流子迁移率低、定向分离能力差等问题, 限制了整体太阳能转化为氢能的效率。

本课题组长期致力于光催化材料的结构设计与界面调控。近期发现, 通过熔盐法所制备的钙钛矿结构 SrTiO₃, 在高温结晶过程中通过 A 位注入特定金属阳离子 (如 La³⁺、Na⁺、K⁺、Cs⁺), 能够有效抑制 B 位

掺杂引起的 Sr^{2+} 离子表面溶解现象[1-3]。该过程还优化了浅缺陷态的引入，从而极大地提升了其在固液相条件下纯水分解中的光催化性能。此外，通过对晶体结构的分析，我们发现高温熔盐法能有效重塑由离子注入引发的晶格缺陷，促进 SrTiO_3 纳米材料中载流子的跃迁与定向分离。

值得一提的是，在地表太阳光谱中，波长大于 780 nm 的红外光占到了总能量的近一半，主要以热辐射形式存在。传统仅依赖光电激发效应的半导体材料难以充分利用整个太阳光谱。为解决这一问题，采用诸如蒸发材料等太阳热光子转换材料，可以有效收集并转化这部分能量，实现太阳能更高效的利用[4-5]。

本文总结了课题组近年来在光催化全水分解制氢领域取得的研究进展，重点介绍了晶面工程、缺陷控制、能带结构调控以及全光谱太阳能利用等方面的突破，为未来的发展提供了新的视角和方向。

参考文献

- [1] Fan Fang*, Zhiyuan Su, Xue Li, Fang Xu, Yanqi Lv, Ruixue Sun, Jinghan Li, Yalei Qin, Kun Chang*. Mechanistic understanding of alkali-metal-ion effect on defect state in SrTiO_3 during the defect engineering for boosting solar water splitting. *Adv. Funct. Mater.*, 2023, 33, 2215242.
- [2] Yalei Qin, Fan Fang, Zhengzheng Xie, Huiwen Lin, Kai Zhang, Xu Yu, Kun Chang*, La,Al-Codoped SrTiO_3 as a Photocatalyst in Overall Water Splitting: Significant Surface Engineering Effects on Defect Engineering, *ACS Catal.*, 2021, 11, 11429-11439.
- [3] Fan Fang*, Jie Zhang, Lijing Xiang, Chong Chen, Nengjie Feng, Yanqi Lv, Kun Chang*, Jun Huang*, Ordering Bimetallic Cu-Pd Catalysts onto Orderly Mesoporous SrTiO_3 -Crystal Nanotubular Networks for Efficient Carbon Dioxide Photoreduction, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, 63, 202405087.
- [4] Jinghan Li, Lingling Ding, Zhiyuan Su, Kun Li, Fan Fang, Ruixue Sun, Yalei Qin, Kun Chang*. Non-lignin constructing the gas-solid interface for enhancing the photothermal catalytic water vapor splitting. *Adv. Mater.*, 2023, 35, 2305535.
- [5] Lingling Ding, Kun Li, Jinghan Li, Qihang Lu, Fan Fang, Tao Wang, Kun Chang*. Integrated coupling utilization of the solar full spectrum for promoting water splitting activity over a CIZS semiconductor. *ACS Nano*, 2023, 17, 11616-11625.

B01-17

缓冲层引入对 BiFeO_3 基薄膜极化行为及光电催化性能的影响

杨超、李泽、刘景顺*

内蒙古工业大学

本文系统研究了缓冲层对 BiFeO_3 (BFO) 铁电薄膜极化行为和光电催化分解水性能的影响规律。试验研究表明：未添加缓冲层的 BFO 薄膜晶粒主要以球形颗粒的形式存在，添加缓冲层后可以明显观察到柱状晶生长，分这一结果证明加入缓冲层可以使薄膜形成强织构，其中 ZnO/BFO 、 LNO/BFO 薄膜分别形成了(110)与(010)织构，织构的形成进一步提高了薄膜的自极化程度。并且 ZnO/BFO 、 LNO/BFO 薄膜的过电位由之前的 279 mV/cm^2 分别下降至 250 mV/cm^2 和 200 mV/cm^2 。Tafel 斜率由 121 mV/dec 分别下降至 103 mV/dec 和 85 mV/dec 。电荷界面转移电阻由 3590Ω 分别降低至 3165Ω 和 2965Ω ，较小的界面转移电阻意味着薄膜可以吸附更多的自由电荷，可以最大程度的减小载流子的复合。总之，薄膜光电催化分解水性能的提升是由于缓冲层与铁电薄膜存在晶格失配现象，进而提升了薄膜自极化程度，从而提高了薄膜内建电场的强度，弥补了光电催化分解水时所需的驱动力。总之，与传统贵金属电化学催化剂相比，BFO 薄膜由于具有较窄的禁带宽度，自发极化以及体光伏效应等特点，在光电催化分解水领域具有一定应用前景。

B01-18

二维面内极化铁电 GeS 中带电畴壁的协同作用及其在光催化水分解中的应用

程森、司亦涛、李乃旭、管杰*

东南大学

全球能源危机和环境恶化促使研究人员寻找可持续的清洁能源解决方案，如风能和太阳能。光催化技术因其能够通过光能实现水、氮或二氧化碳的氧化还原反应，具有重要的应用前景。铁电材料由于其可控的电极化特性，在光催化中展现出巨大潜力。然而，之前的研究主要集中在面外极化材料，而对于平面内极化材料，尤其是带电畴壁对催化性能的影响研究较少。研究基于第一性原理密度泛函理论（DFT）计算，构建了含有相反平面内极化畴的 GeS 单层结构，研究带电畴壁（DWs）对光催化水分解的协同作用。结果表明，畴区呈现半导体特性而畴壁具有金属特性。并且相邻正负畴壁间存在约 0.4eV 的能带偏移，验证了畴区内建电场的存在。DWs 中的金属态显著扩大了光学吸收范围，并改善了可见光区的吸收。而内置的电场将电子/空穴驱动到带正电/负电的 DWs 上，促进了光生载流子分离。在氢还原和水氧化反应的过程中，带电荷的 DWs 可以影响表面的活性，并大幅降低了能垒。在中性环境和光照下，水氧化和氢还原反应都表现为放热反应，证实了 GeS 材料在光催化水分离中的优越性能。该机制在其他二维平面内极化铁电材料中同样具有广泛适用性，为调控光催化材料性能提供了新的思路。

B01-19

萤石氧化锆上光热甲酸分解制备高纯一氧化碳

李亚光*、刘邦

河北大学

本研究提出了一种无需分离纯化步骤即可高效制备高纯度一氧化碳（CO）的方法，利用光热驱动的甲酸脱水反应，并开发出纯净的萤石型二氧化锆（fluorite ZrO_2 ）作为关键催化剂。通过第一性原理计算发现，萤石型 $\text{ZrO}_2(111)$ 晶面能显著抑制甲酸脱氢副反应（生成 H_2 ），从而实现 100%选择性的甲酸脱水生成 CO。理论分析揭示，该晶面上的饱和配位表面氧原子具有负电势且碱性弱，能够排斥 HCOO^- 等负性中间体的吸附与转化，彻底切断了 H_2 生成路径。

实验方面，研究团队采用爆炸法合成出高纯度的萤石型 ZrO_2 纳米片，其在 250 °C 下可实现 CO 产率高达 $55 \text{ mmol g}^{-1} \text{ h}^{-1}$ ，且完全无 H_2 生成，CO 选择性达 100%。该催化剂在连续反应超过 80 小时后仍保持稳定性能，并具优异的结构稳定性。原位红外光谱（DRIFTS）进一步证实，反应过程中仅存在 COOH 脱水中间体，未观察到 HCOO 信号，验证了理论预测的中间体排斥机制。

在能源系统方面，研究构建了 TiC/Cu 为基底的光热反应器，将 F- ZrO_2 与自然光集成，实现了无需二次能源供给的纯 CO 生产。在 0.5 sun (0.5 kW m^{-2}) 光照下，CO 生成速率提升至 $83 \text{ mmol g}^{-1} \text{ h}^{-1}$ ，太阳能到化学能转化效率达 12.3%，超过美国能源部提出的 10% 目标。在户外实验中，该系统每天可产出 $1,538 \text{ L m}^{-2}$ 的纯 CO，材料投入-产出利润约为 18,714 美元 每平方米 每年。

本研究不仅提出了一种绿色、低成本、可扩展的高纯度 CO 生产策略，还提供了通过表面配位结构调控副反应生成的普适性催化设计思路，为高纯气体产业提供了重要的技术突破。

B01-20

等离激元光催化材料及其在碳基小分子转化中的研究

刘东*、熊宇杰

中国科学技术大学

太阳能作为一种丰富、清洁、无污染且世界分布广泛的清洁能源得到了人们的青睐。利用太阳能驱动将主要温室气体 CO_2 和 CH_4 转化为有用的化学品，是建立负碳排放的新途径，不仅可从源头上减少碳基能源使用，还可将 CO_2 和 CH_4 “变废为宝”。[1]构建太阳能驱动人工碳循环系统，研究碳基分子转化机制，实现 CO_2 和 CH_4 分子高效定向转化，对我国清洁能源转型、建立负碳能源体系及实现双碳目标具有重要意义，不仅可优化能源结构，也有利于实现可持续的人工碳循环。综合双碳目标和科技发展需求，非常有必要开

发高效的催化材料, 拓展 CO_2 和 CH_4 定向转化的模型体系, 提升碳基小分子催化转化的整体利用价值, 发展出高效定向碳基小分子转化制备高值化学品的体系。近年来, 利用太阳光驱动实现 CO_2 选择性还原、 CH_4 选择性氧化被认为是一种可替代高耗能的热催化过程方法。等离激元效应耦合催化剂因其宽光谱光吸收、高效的光热转换效率等优点被认为是一种理想的光催化剂, 其中活性位点和光吸收单元的精准设计是开发高效催化剂的关键。在本次报告中, 报告人将介绍几种等离激元催化材料的设计原则及其在 CO_2 和 CH_4 转化中的研究, 具体地, 将介绍等离激元光催化剂的合成策略和设计原理、等离激元效应研究及其光热特性分析、催化过程的原位谱学研究等机理研究。

参考文献

- [1] Wan, X.#; Li, Y.#; Chen, Y.#; et al.; Liu, D.*; Long, R.; Liew, K. M.; Xiong, Y.*, A nonmetallic plasmonic catalyst for photothermal CO_2 flow conversion with high activity, selectivity and durability, *Nature Communications* 15, 1273 (2024).
- [2] Ma, J.#; Yu, J.#; et al.; Gong, W.*; Liu, D.*; Li, Y., Long, R.; Zhao, H.*; Xiong, Y.*, Rational design of N-doped carbon coated cobalt nanoparticles for highly efficient and durable photothermal CO_2 conversion, *Advanced Materials* 35, 2302537 (2023).
- [3] Zhai, G.#; Cai, L.#; et al.; Zhang, N.*; Liu, D.*; Xiong, Y.*, Highly efficient, selective, and stable photocatalytic methane coupling to ethane enabled by lattice oxygen looping, *Science Advances* 10, eado4390 (2024).
- [4] Wan, X.#; Zhao, Y.#; Li, Y.#*; et al.; Liu, D.*; Xiong, Y.*, Tailoring oxygen vacancies with atomically dispersed Cu sites for stable and efficient photothermal CO_2 conversion, *Angewandte Chemie*, e202505244 (2025).
- [5] Zhai, G.#; Yang, S.#; Chen, Y.#; et al.; Liu, D.*; Xiong, Y.*, Direct photocatalytic oxidation of methane to formic acid with high selectivity via a concerted proton–electron transfer process, *Journal of the American Chemical Society* 147, 2444 (2025).

B01-21

多孔氮化碳的无模板合成及光催化抗生素降解与致病菌消杀

陈智*、贾荣荣、蔡宇星、王筱卓、吴健豪、李春颜、李兰、金成超

中国计量大学

近年来, 抗生素污染问题日益凸出, 对生态环境的影响日趋严重, 是受到人们的广泛关注一类新型污染物, 亟需对其开展有效治理, 以实现生态环境保护 and 可持续发展。半导体光催化剂技术以太阳光为驱动, 是实现水中抗生素污染物高效治理的一个有效途径, 而高效光催化剂的开发是半导体光催化技术的核心。本文首先介绍了近年水中抗生素污染物光催化治理所取得进展及改性策略。其次, 采用无模板法成功制备了中心开孔的, 并成功应用于水中多种抗生素污染物高效光催化去除以及金葡球菌的光催化消杀。再者, 开发了高浓度锌单原子掺杂的多孔氮化碳纳米管的无模板制备, 实现了水中抗生素污染物的光催化高效去除以及致病菌的高效光催化消杀。进一步开发了新型光催化剂材料, 并应用于无牺牲试剂的纯水光催化产双氧水。此外, 揭示了光催化技术在环境污染治理领域的独特作用, 必将有助于抗生素、致病菌等新型污染物的高效环境污染治理以及双氧水的高效生产。

参考文献

1. Yang X., Chen Z*, Zhao W, et al., *Chemical Engineering Journal*, 2021, 405, 126806.
2. Chen X., Chen Z*, et al., *Journal of Colloid and Interface Science*, 2025, 683, 1049–1056.
3. Li C., Chen Z*, et al., *Journal of Colloid and Interface Science*, 2025, 683, 1049–1056
4. Xia S., Chen Z*, et al., *Journal of Catalysis*, 2024, 433, 115488.
5. Zhao W., Chen Z*, Yang X, et al., *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2020, 132, 110040.

B01-22

等离激元光（热）催化材料

安兴达*

苏州大学

等离激元光催化（Plasmonic photocatalysis）材料凭借特征的局域表面等离激元共振（Localized Surface Plasmon Resonance, LSPR）现象，能够在可见光区产生高效光吸收，从而实现对太阳光的充分利用；因此在光催化体系构筑中独树一帜。对 LSPR 的共振激发及激发态非辐射性弛豫能够引发一系列光物理化学响应，如共振电磁场效应、等离激元热载流子效应及光热效应等；当其发生在催化界面时，可为等离激元光催化提供诸多可行的催化机制。然而，由于不同等离激元增强机制在催化过程中同时存在并相互耦合，对其催化机制的深入理解、区分量化及时空调制极具挑战；这也限制了等离激元光催化的实际应用。针对上述问题，在此前的工作中，报告人从兼具优异光物理化学响应与本征催化活性的等离激元催化体系精准构筑入手，利用原位光化学沉积等策略，设计了具有空间分离特性的高效等离激元天线-反应器复合催化体系；在机制研究方面，发展了基于各向异性 LSPR 效应、多 LSPR 组分选择性激发效应的催化机制时空调制策略，初步实现了催化过程中热与不同非热机制贡献的区分量化；并最终通过催化机制波长选择性调制，在二氧化碳还原、硝酸盐还原和水分解等反应体系中实现了光热/光化学协同催化，显著优化了等离激元光催化性能。上述研究为等离激元催化机制研究提供了深入的见解，并为光催化体系设计提供了重要设计原则。从更广泛的角度，上述研究有望为太阳光能高效利用与转化起到有力推动作用。

B01-23

P 掺杂和 Ru 单原子协同促进 g-C₃N₄ 的光催化产氢活性

薛艳君*

山东科技大学

由于光生载流子的快速复合和活性位点不足，高效光催化剂的开发仍然是 H₂ 演化领域的一个重大挑战。本研究通过一步热解法制备了 P 掺杂的 g-C₃N₄ (P-g-C₃N₄)，并将 Ru 单原子锚定在 P-g-C₃N₄ 基底上，形成了 Ru 单原子修饰的 P-g-C₃N₄ (Ru₁/P-g-C₃N₄)。Ru₁/P-g-C₃N₄ 复合材料的光催化产氢速率为 7540 μmol g⁻¹ h⁻¹，大约是纯 g-C₃N₄ 的 443.5 倍。同时，在 λ = 370 nm 和 456 nm 处，表观量子产率 (AQE) 值分别为 11.4% 和 4.01%。实验测试和 DFT 计算表明，P 原子取代 C 原子进入 g-C₃N₄ 骨架中，P 的掺杂可以引入缺陷态，缩小带隙，增强可见光吸收能力，诱导 d 带中心向费米能级移动。在 P-g-C₃N₄ 载体中引入 Ru 单原子可以形成强配位键 (Ru-N 键)，这种金属-载体相互作用会引起局部电荷的重新分布，不平衡的局部电荷分布会改变 Ru 的电子性质，从而影响吸附 H* 的局部电子云密度，更有利于 H* 的活化。此外，Ru 单原子可以作为活性位点接收光生电子，建立从 P-g-C₃N₄ 到 Ru 位点的有效电子转移路径，显著降低 H⁺ 还原为 H₂ 的过电位。这项工作为通过原子级金属负载开发高性能单原子光催化剂提供了合理的设计策略。

B01-24

原子级分散低配位钼高效利用空穴加速光催化 C-H 键活化

刘望喜*

南京大学

光催化醇无受体脱氢反应为制备羰基化合物和清洁氢气提供了可行策略。然而，烷氧基 C-H 键断裂的动力学缓慢，导致光生空穴利用率低下，严重制约了催化活性。本研究在超薄 ZnIn₂S₄ 纳米片上构筑原子级分散的低配位钼活性位点，显著加速光催化 C-H 键活化。以苯甲醇为模型底物时，在 400 nm 波长下实现 45.2% 的内量子效率，且苯甲醛选择性高达 99%。系统的实验表征与理论计算表明：低配位钼通过调控最高占据分子轨道的局域原子构型，可在皮秒尺度内捕获光生空穴；同时，该特异性钼位点显著延长了光生空穴寿命及扩散距离，并优化了烷氧基 C-H 键活化的反应驱动力，从而获得卓越的催化性能。该工作为提升空穴利用效率以促进光催化 C-H 键活化做出了重要突破。

B01-25

常温常压水解离制备过氧化氢新策略

李顺*

江苏大学

过氧化氢 (H_2O_2) 是一种重要的工业化学品和可持续能源载体。然而, 如何在温和条件下实现简单、高效且经济的合成仍存在重大挑战。当前工业制过氧化氢的蒽醌法不仅能耗高且污染环境。氢氧混合气直接合成法受限于必须使用钌基催化剂, 且需处理高压易燃氢气, 存在显著安全隐患和成本问题。为解决这些安全、经济及环境问题, 以水和氧气为原料直接合成 H_2O_2 被视为理想解决方案——其原子利用率可达 100%。但水分子固有的稳定性 (O-H 键均裂解离能高达 $118 \text{ kcal mol}^{-1}$) 使该途径仍面临巨大挑战。目前突破这一能垒的策略通常需要光、电或机械力等高能输入, 涉及光催化、激光直接合成、电催化和机械催化等技术。此外, 这些方法往往依赖复杂昂贵的催化剂, 严重制约了其实际应用潜力。

本研究提出了一种室温常压催化水与空气直接生成过氧化氢的新策略, 发现具有 Sn 空位的硒化锡 (SnSe) 纳米片可在常温常压下直接催化水与氧气合成 H_2O_2 , 且无需额外能量输入 (如光、电)、助催化剂或牺牲剂。该方法在 40°C 时达到 $2.6 \text{ mmol g}^{-1}\text{h}^{-1}$ 的最优产率, 并在室温流动反应器中实现超过 50 小时的长期稳定生产 (0.3 mmol L^{-1})。实验与理论分析表明, 这种独特的热催化效应源于动态过程: 锡空位缺陷移动诱导 SnSe 纳米片表面的可逆重构实现了水分子连续吸附/解离。该研究为 H_2O_2 生产提供了一种极其简单、高效且完全绿色的策略, 对涉及水活化的其他催化反应也将具有更广泛的启示。

B01-26

光热催化二氧化碳制甲醇

王璐*

香港中文大学 (深圳)

针对纳米材料表面活性位点的构建, 可以有效调节催化反应的催化性能以及选择性。我们发现表面含有羟基的氧化铜纳米颗粒, 具有表面受阻路易斯酸碱对, 可以异裂活化氢气分子, 产生 H^+ 与 H^- 。[1] 该氢气活化机制有益于多种催化反应, 在能源和环境等领域的新兴应用中具有广阔的发展前景。在进一步应用该活性位点时, 我们发现氧化铜纳米颗粒在常压、光照和加热的条件下可以高选择性地催化二氧化碳加氢制备甲醇等燃料。在将其组装成超结构纳米棒后, 该材料的催化性能被显著提升。[2,3] 在之后的工作中, 我们通过氢化氧化铜表面, 制备了以氧空位为主要催化活性位点的黑色氧化铜, 为氧化铜光热二氧化碳加氢制备甲醇奠定了基础。[4] 在前期黑色氧化铜的基础上, 我们在表面再生受阻路易斯酸碱对, 实现了无外部加热制备甲醇, 并探索出了该黑色氧化铜串联催化制备甲醇新机制。[5] 同时, 我们近期发现了氧化铜与表面疏水碳氢层的独特催化机制。

[1] Lu Wang, Tingjiang Yan*, Rui Song, Wei Sun, Yuchan Dong, Jiuli Guo, Zizhong Zhang, Xuxu Wang, Geoffrey A Ozin*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, 58, 9501.

[2] Lu Wang, Mireille Ghossoub, Hong Wang, Yue Shao, Wei Sun, Athanasios A Tountas, Thomas E Wood, Hai Li, Joel Yi Yang Loh, Yuchan Dong, Meikun Xia, Young Li, Shenghua Wang, Jia Jia, Chenyue Qiu, Chenxi Qian, Nazir P Kherani, Le He*, Xiaohong Zhang*, Geoffrey A Ozin*, *Joule*, 2018, 2, 1369.

[3] Tingjiang Yan*, Lu Wang (co-first author), Yan Liang, Meysam Makaremi, Thomas E Wood, Ying Dai*, Baibiao Huang, Abdinoor A Jelle, Yuchan Dong, Geoffrey A Ozin*, *Nat. Commun.*, 2019, 10, 2521.

[4] Lu Wang*, Yuchan Dong, Tingjiang Yan, Zhixin Hu*, Abdinoor A Jelle, D  ora Motta Meira, Paul N Duchesne, Joel Yi Yang Loh, Chenyue Qiu, Emily E Storey, Yangfan Xu, Wei Sun, Mireille Ghossoub, Nazir P Kherani, Amr S Helmy, Geoffrey A Ozin*, *Nat. Commun.*, 2020, 11, 2432.

[5] Zeshu Zhang, Chengliang Mao*, D  ora Motta Meira, Paul N. Duchesne, Athanasios A. Tountas, Zhao Li, Chenyue Qiu, Sanli Tang, Rui Song, Xue Ding, Junchuan Sun, Jiangfan Yu, Jane Y. Howe, Wenguang Tu, Lu Wang* & Geoffrey A. Ozin*, *Nat. Commun.*, 2022, 13, 1512.

B01-27

光催化甲烷转化制备高值化学品

宋辉*

天津大学

甲烷是天然气、页岩气、可燃冰等的主要成分，具有储量丰富、价格低廉和相对清洁等优势。除了用作燃料，甲烷还可以替代煤或石油作为合成大宗化学品的化工原料。目前工业化的甲烷-合成气-甲醇合成（或者费托合成）间接工艺路线面临高能耗、高成本、低碳氢利用率等问题。因此，开发温和条件下甲烷转化技术势在必行。光催化甲烷直接氧化为高附加值化合物可以在低温甚至室温下进行，近些年得到了广泛的关注。但甲烷分子具有四面体对称性，其碳氢键特别稳定，而高值化合物又比甲烷更容易氧化，因而甲烷的选择性催化活化和定向转化是光催化甲烷转化所面临的最关键科学问题。

针对这一关键科学问题，我们开发了负载纳米金属助催化剂的 ZnO 和 TiO₂ 光催化剂，并采用水相介质和对甲烷加压的反应条件，首次用氧气以高反应量子效率以及高选择性（>90%）将甲烷直接氧化为甲醇等含氧化合物。CH₄ 和 O₂ 分别被光激发产生的空穴和电子氧化还原为 $\cdot\text{CH}_3$ 和 $\cdot\text{OOH}$ ，这两者结合并经过一系列反应最终生成甲醇和甲醛，避免了过度氧化的发生。

此外，我们设计了负载 Au 纳米颗粒的 ZnO/TiO₂ 复合光催化剂，其在气固相流动反应器中利用氧气将甲烷高效、高选择性（>90%）地光氧化偶联生成乙烷。通过构建 ZnO/TiO₂ 异质结构并调控其组分和表界面，促进了光生电子和空穴的分离。同时开发 Au 助催化剂来增强 O₂ 活化和促进甲烷解离生成的甲基物种的脱附，即在气相中形成 $\cdot\text{CH}_3$ 自由基，并进一步通过 C-C 键偶合生成 C₂H₆，避免了 CH₄ 的过度氧化成 CO₂。

B01-28

面向光热催化的低热辐射光学选择性催化剂设计

杨争伟、朱斌、朱嘉*

南京大学

光热催化通过将清洁的光子转化为热能来驱动催化反应，能将 CO₂ 转化为高附加值的化学品，并希望耦合现有的热催化工业系统，而被认为是实现碳中和非常有前途的策略。决定光热催化性能的关键因素主要有：1. 最大化太阳光的吸收、2. 最小化催化剂的辐射热损耗、3. 实现卓越的本征催化活性。过去，许多研究者通过对带隙调控、表面等离子体共振效应和缺陷工程等方法以提升太阳光的吸收率。亦有许多研究者通过表面原子排列与活性位点的调控、电子结构调控、晶相和晶面的控制等方法致力于提高催化剂的本征活性。然而迄今为止，催化剂自身的热辐射损耗长期被忽略，这会降低光热转化效率，进而影响光热催化性能。

本工作提出了一种基于 Janus 设计的 Ti₃C₂T_x 光谱选择性催化剂。该设计首次同时实现优异的太阳光吸收率（~88%）和极低的中红外发射率（~21%）以及良好的催化活性，为催化反应提供了近 83 K 的温升，从而实现了卓越的催化性能。并且，该设计能够负载不同的金属纳米颗粒催化剂，适用于不同种类的光热催化反应。以工业中典型的 Sabatier 反应和逆水煤气反应为例，在测试中通过降低 70% 的中红外发射率，能使催化剂在相同光功率下提升近 3 倍的 CH₄ 和 CO 的产率。值得注意的是，在 2 W cm⁻² 的光功率下，Sabatier 反应的产率达到了 3 摩尔量级，创造了无活性载体催化剂的性能纪录。该设计策略有望为光热催化领域开辟新的研究路径。

B01-29

氧空位增强 Cu/Cu₂O 肖特基结中分子氧活化的近红外光驱动高效光热催化机制

王昊天、孙少东*、崔杰

西安理工大学

传统氧化亚铜（Cu₂O）光响应范围局限于可见光区域，近红外光利用率低，因而限制了其光催化性能的进一步提升，故研制高效近红外光驱动的 Cu₂O 基光催化材料并揭示其近红外光驱动污染物降解的内在机制迫在眉睫。本研究采用 H₂MoO₄ 模板辅助液相还原法，制备了富含氧空位（OVs）的核壳结构 Cu@Cu₂O

复合材料。近红外光催化降解四环素 (TC) 实验表明: 120 分钟内该材料对 TC (40 mg/L) 溶液的降解率达 85.1%。近红外光催化活性提升可归因于: 富含 OV 的 Cu_2O 与原位还原形成的 Cu 纳米粒子之间形成肖特基界面, 加速 Cu 纳米颗粒本征 LSPR 效应产生的热电子向 Cu_2O 的转移, 而半导体 Cu_2O 中的光生空穴被储存在肖特基势垒中, 从而实现了显著改善的光电荷分离效率; 同时 Cu 的本征 LSPR 效应与 OV 诱导的缺陷态 LSPR 效应共同拓宽了材料的近红外光吸收范围, 产生的光热效应使反应体系温度明显升高, 从热力学角度促进分子氧活化, 为持续生成高活性 ROS 提供了保障, 使得 $\text{Cu}@\text{Cu}_2\text{O}$ 在近红外光照射下对 TC 废水表现出更高的光热降解性能。本研究为开发其他类型的近红外光热催化材料提供了新思路。

B01-30

Efficient photothermal catalytic methane dry reforming over rich oxygen vacancy catalysts

Lingxin Meng*

Shandong University of Science and Technology, No.579 Qianwan Harbour Road, Xin'an Street, Huangdao District, Qingdao, Shandong Province, China

The methane dry reforming (DRM) to produce synthesis gas is of great significance for greenhouse gas elimination. However, high energy consumption and catalyst deactivation constrained its development. In this study, the catalysts of Ni nanoparticles supported on ZrO_2 , La_2O_3 and $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ were prepared and employed in photothermal catalytic DRM. High yield of H_2 and CO (76.2 and 99.1 mmol g⁻¹ min⁻¹) and excellent durability (50 h) were achieved merely under focused light irradiation. 10Ni/ La_2O_3 exhibited better resistance to carbon deposition compared to 10Ni/ ZrO_2 and 10Ni/ $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$. Structural characterization and experimental data indicated that La_2O_3 has abundant oxygen vacancies, which can adsorb and activate CO_2 to produce reactive oxygen species. Oxygen species transfer to nickel nanoparticles through the strong Ni- La_2O_3 interface to accelerate carbon oxidation. The experimental results indicated that light illumination can not only drive DRM reactions through photothermal conversion, but also reduce the activation energy of reaction molecules to improve catalytic activity. Moreover, light irradiation significantly reduced the temperature and degree of CO disproportionation, thereby improving catalytic stability.

B01-31

氧配位调控单原子位点促进光/电催化小分子转化

李云祥*

华中师范大学 化学学院

单原子材料在光催化小分子转化反应中展现出广阔前景, 然而, 传统单原子位点配位结构较单一, 制约了金属中心电子结构的调变并限制了小分子催化转化活性和选择性。鉴于此, 我们发展了多种氧配位调变单原子电子结构的策略, 构建了 4 种氧配位调制的高本征活性单原子位点 (Fe-N4O, Zn-O4, Zn-N3O, Zn-N2O2-S), 实现了高活性、高选择性的光催化 CO_2 还原和 O_2 还原。结合 X-射线吸收光谱、球差电镜、理论计算等方法, 分析了氧原子在金属中心第一配位壳层中的配位方向、距离和数量等参数, 氧配位对金属中心电子结构的调控效果, 以及对 CO_2 、 O_2 的吸附、活化和转化的影响, 具体如下: (1) 提出了一种 NH_4Cl 辅助的低温 (500 °C) 块体金属原子化策略, 实现了 O 在垂直于 Fe-N4 平面方向上的精准配置, 发展了五配位高价态 Fe-N4O 位点, 高价态 Fe^{3+} 可促进 CO_2 吸附、活化并降低关键中间体 *COOH 的形成能垒, 以 86.7% 的高选择性实现了 CO_2 光还原为 CO, 并且创造了当时应用于该反应单原子周转频率的最高记录; (2) 发展了一种含有明确 Zn-O4 单原子位点的导电金属有机框架材料 (MOF), 通过低温热处理方法脱除 MOF 孔隙中的溶剂分子, 实现了 MOF 骨架结构的可控收缩, 从而精确诱导了 Zn-O 键长的亚埃米级收缩。Zn-O 键长的收缩诱导 Zn 中心转变为富电子状态, 促进了 Zn 对 O_2 的吸附和关键中间体 *OOH 的生成, 进而提高了其光催化 O_2 还原产 H_2O_2 性能; (3) 提出了一种醋酸根介导策略, 用于构筑非对称配位的 Zn-N3O 单原子位点, N、O 的共同配位杂化有效优化了 Zn 中心的化学价态, 促进了 O_2 吸附并降低了 *OOH 的形成能

垒。此外, Zn-N3O 位点对光分解 H₂O₂ 呈现惰性, 从而实现了优异的光催化 O₂ 还原产 H₂O₂ 性能; (4) 发展了多配位壳层杂化的 Zn-N₂O₂-S 仿酶单原子位点, 实现了第一配位壳层(N₂O₂)和第二配位壳层(S)中化学元素的精准配置。相比于单一配位壳层杂化, 多配位壳层元素的同步杂化可通过协同效应进一步提高 Zn 中心价态, 并优化关键中间体*OOH 在 Zn 位点上的形成能垒, 利于 O₂ 的两电子还原反应路径, 进而实现了高选择性(96%)和高稳定性(120 h)的 O₂ 到 H₂O₂ 的电还原制备。以上研究结果表明氧原子配位几何参数对单原子电子结构及其本征活性的显著调控作用, 为单原子催化剂的理性设计提供参考。

B01-32

光催化记忆效应：黑暗活性的赋予与光催化性能的提升

李琦*

西南交通大学

报告人的前期系列研究工作表明, 通过适当的材料设计, 光催化材料可以在光照条件下存储光生载流子, 在光照关闭后能够通过所存储光生载流子的持续释放来产生活性基团, 从而产生光催化记忆效应, 使其能在无光条件下较长时间保持反应活性, 解决了常规光催化材料在光照关闭后失去活性的难题, 大大增强光催化技术对环境污染的处理效果, 降低处理成本和能耗, 使光催化技术在更广泛的环境治理领域获得新的应用。报告人近期发现, 光催化记忆效应可以通过改变材料内部的电子结构, 持续影响材料内部的缺陷产生、光响应范围、能带结构、光生载流子分离效率等重要性能, 从而获得明显等光催化性能提升。在此次报告中, 报告人将简述光催化记忆效应的原理, 着重介绍通过光催化记忆效应提升材料光催化降解有机污染物、还原二氧化碳等方面的研究进展。

B01-33

微环境调控提升压电光催化合成氨与过氧化氢

刘冠宇*

同济大学

通过微环境调控策略, 设计并制备了基于压电半导体的催化剂, 成功构建了高效压电-光催化体系, 可驱动硝酸盐还原合成氨以及水与空气合成过氧化氢这两条重要绿色合成路径, 分别作为高能耗哈伯-博世法和产生有害副产物蒽醌法的可持续替代。该体系利用压电半导体而非传统半导体, 结合了压电与光催化效应。利用单原子嵌入诱导对称性破缺, 显著增强材料压电性, 使其在机械应力作用下因极性形成内建电场; 该效应协同催化剂中丰富的氮空位, 驱动光生载流子的高效分离与传输, 抑制复合。在硝酸盐还原中, 通过配位环境优化降低了加氢能垒, 使催化剂在无牺牲剂条件下实现了 $25.2 \text{ mg h}^{-1} \text{ g}_{\text{cat}}^{-1}$ 的氨产率, 并在 pH 1-14 及 NO₃⁻ 浓度 0.01-2 mol L⁻¹ 的宽范围内保持产率大于 $5 \text{ mg h}^{-1} \text{ g}_{\text{cat}}^{-1}$, 展现出废水处理的潜力。在双氧水合成中, 仅以水和空气为反应物, 双氧水产率可以达到 $2080 \mu\text{mol h}^{-1} \text{ g}_{\text{cat}}^{-1}$ 。

B01-34

分子筛限域构筑异质界面光催化剂

余萍*、李雪静

吉林大学

光催化技术被认为是解决目前严峻的能源短缺和环境污染问题的关键技术之一。有效的光捕获和电荷分离在光催化太阳能转换领域至关重要。本文设计制备了多种中空半导体异质结光催化剂, 并且在中空壳层的内部实现了亚纳米尺寸的助催化剂纳米颗粒可控修饰, 促进了光生电荷的高效传导; 此外, 基于分子筛的限域效应及牺牲模版作用, 可实现空间分离的氧化及还原助催化剂界面的构筑, 促进光生电子和空穴向相反的方向传递, 进而促进光生电子-空穴对的高效分离; 且得到的中空结构利于提高对光的吸收效率, 其较大的比表面积利于对反应底物的吸附和扩散; 所制备的复合光催化材料展现出优异的光催化水裂解产氢以及光催化二氧化碳还原生产太阳能燃料的性能, 同时, 该催化剂的性能明显优于传统的实心半导体纳米颗粒、单一组分的空心半导体纳米球、单一助催化剂纳米粒子修饰的半导体, 以及通过浸渍法制备的金属纳米粒子修饰的半导体纳米球等。对实现“双碳”目标具有重要意义。

B01-35

二维 MOF 基光催化剂薄膜的设计及其在纯水中高效合成 H_2O_2 的研究

王小飞*、夏洒洒、李兰、包晨昊、陈智、金成超

中国计量大学

光催化合成双氧水因仅需 H_2O 、 O_2 和太阳能而备受关注。然而，现有光催化剂普遍面临可见光响应有限、需牺牲剂辅助、粉末回收困难等挑战。金属有机框架（MOF）因其可调控的孔结构和光吸收特性成为理想候选材料，但载流子分离困难且复合率高的问题制约其效率。本研究通过精准调控 MOF 的结构、合成异质结，开发了两类高效稳定的二维 MOF 基光催化剂薄膜，实现了纯水中 H_2O_2 的高效光合成。首先，通过溶剂热法合成了 Ga^{3+} /四羧基卟啉（TCPP）共掺杂的二维 $\text{NH}_2\text{-MIL-53(Al)}$ 薄膜（NMA-Ga5%-L30），其中 Ga^{3+} 的 d^{10} 电子构型促进了电荷分离，TCPP 扩展了光吸收范围，在纯水中 H_2O_2 产率达 $268.7 \mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$ ，为未掺杂 MOF 的 3.5 倍。其次，通过原位生长策略构建了 2D Z 型 $\text{Al-TCPP/In}_2\text{S}_3$ 异质结薄膜（Al/In15%），其内建电场显著抑制载流子复合， H_2O_2 产率进一步提升至 $422.88 \mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$ （较 Al-TCPP 提高 2.44 倍），并通过旋转圆盘电极实验证实其遵循直接 2e^- 氧还原路径。薄膜化设计解决了粉末催化剂回收难题，XRD 证实反应后晶体结构稳定。本研究为纯水体系中太阳能驱动 H_2O_2 合成提供了兼具高活性、易回收和长寿命的薄膜催化剂设计新策略，具有实际应用价值。

B01-36

三维钒酸铋纳米通道的结构调控及其优异的可见光催化固氮性能

王鑫宇*、田健

山东科技大学

开发用于高效氮还原反应（NRR）合成 NH_3 的光催化剂迫在眉睫，但仍面临巨大挑战。本文采用模板法制备了具有有序多孔纳米通道结构的 3D BiVO_4 作为光催化剂。优化后的 3D BiVO_4 光催化 NH_3 合成速率显著提高（ $7.81\text{mM h}^{-1}\text{ g}^{-1}$ ），是块体 BiVO_4 的 7.6 倍，且稳定性良好。同时，在 370 和 456nm 光照条件下，0.2g 3D BiVO_4 表观量子产率（AQE）分别为 3.65% 和 2.55%。3D BiVO_4 通过模板法呈现出有序的多孔纳米通道结构，增加了入射光的散射和反射，减少了电荷转移距离，增加了比表面积，从而提高了光吸收能力，促进了电荷和质量转移，增加了活性位点。DFT 计算证实 BiVO_4 的 N_2 固定通过远端路径进行，且活性中心为靠近氧空位的 V 位，有利于 *NNH 和 *N 中间体的生成，从而促进 NRR 过程中的加氢动力学。该研究为开发环境友好、高效的固氮光催化剂提供了思路。

B01-37

光电极表面原子级调控及其光电催化性能研究

刘厚江、何芳*

天津大学

针对光电极表面载流子复合与光腐蚀引起的光转化效率低、稳定性差等问题，提出了原子尺度上的表面精确调控手段，并对最有潜力应用的钒酸铋和二氧化钛材料进行了相关研究。利用表面选择性阳离子置换法，实现了表面能带调制、载流子复合位点抑制、活性位点引入等多角度的调控，并进一步将原子级调控应用到了二氧化钛上，原位构建了类单原子 Co 助催化剂。选择位点原子级调控能够更精确调控材料的电子结构，进而改善载流子利用效率。此外，阳离子置换调控作为普适性的调控手段，有望应用于储能、催化、传感、吸波等诸多领域。

B01-38

自旋极化促进 Fe 纳米颗粒负载石墨氮化碳中超快载流子动力学和激子解离的高效 CO_2 光还原池浩强¹、冷业成²、丁成¹、李天浩²、张永才³、袁俊阳¹、涂文广²、高娃⁴、姚颖方¹、朱熹²、周勇^{*1,2}、邹志刚^{1,2}

1. 南京大学

2. 香港中文大学（深圳）

3. 扬州大学

4. 天津理工大学

激子特性的调节在提高光催化剂活性方面起着至关重要的作用，这主要是由于光诱导的电子-空穴对之间强烈的库仑相互作用导致它们快速重组。在本研究中，我们探讨了由氮化石墨碳($g-C_3N_4$)和铁(Fe)纳米粒子组成的纳米杂化体中的自旋极化效应，这种效应可加速激子解离和自旋选择性电子转移，从而提高 CO_2 到 CO 的选择性光还原。机理研究表明，嵌入铁纳米粒子表面氧化铁层中的 Fe^{2+}/Fe^{3+} 氧化还原对通过双交换相互作用($Fe^{2+}-O-Fe^{3+}$)起到了超快电荷转移穿梭机的作用。这一过程有助于自旋选择性电子从 $g-C_3N_4$ 转移到 Fe 物种，从而促进 CO_2 的高效转化。这项工作为设计自旋依赖型光催化剂实现高效太阳能转换提供了新的见解。

B01-39

工程化原子级 Ag_1-N_6 位点以增强可见光驱动抗菌膜对耐药菌的抗菌性能

马蓉、饶绍盛、刘芹芹、杨娟*

江苏大学材料学院

全球约有 30% 的人口无法获得安全的饮用水，每年有两百万人死于水传播疾病。与传统的水消毒方法(臭氧、卤化剂和紫外线)相比，基于太阳能的光催化是一种绿色消毒技术。与紫外线或红外线激发的光催化过程相比，可见光驱动的抗菌膜技术前景广阔，可广泛应用于各种实际的水处理应用中。在此，我们制备了银(Ag)单原子锚定的 $g-C_3N_4$ (P-CN) 纳米片(Ag_1/CN)，然后采用旋涂法制备了基于 Ag_1/CN 的膜，以在天然水和生活污水中实现有效的抗菌性能。所掺入的银单原子形成了 Ag_1-N_6 基序，这增加了氮原子周围的电荷密度，从而产生了约比纯 P-CN 强 17.2 倍的内置电场，并优化了活性氧物质(ROS)的生成动态。此外， Ag_1-N_6 基序抑制了银离子的释放，确保了良好的生物相容性。基于第一原理计算， O_2 在 Ag_1/CN 上的吸附能(-0.32 eV)低于 P-CN (-0.07 eV)，表明负载的银单原子可以降低 O_2 活化的能量障碍，产生额外的 OH 自由基，与 O_2 协同作用，有效地中和细菌。因此，浓度为 30ppm 的 Ag_1/CN 粉末催化剂在可见光照射 4 小时的情况下，对耐药细菌(大肠杆菌、金黄色葡萄球菌、卡那霉素耐药的大肠杆菌和甲氧西林耐药的金黄色葡萄球菌)的抗菌效率达到了 99.9%。这种效果比 P-CN 粉末催化剂高出 24.8 倍。此外，基于 Ag_1/CN 的膜在使用自制流体装置对天然水和生活污水进行处理时，能够保持 99.9% 的杀菌效率，展示了其在水消毒方面的潜力。值得注意的是， Ag_1/CN 催化剂的可见光驱动抗菌效率超过了大多数已报道的基于 $g-C_3N_4$ 的催化剂/膜。

B01-40

结晶氮化碳可见光及近红外光活性的调控策略

张国强*

大湾区大学(筹)

传统氮化碳面临着不完全聚合的问题，导致其无定型结构，严重阻碍了聚合物平面上光生载流子的转移。此外，特定的能带结构决定了其太阳光利用范围仅到 460 nm 和不到 10% 的太阳能量，严重制约了在能源光催化领域的应用。针对结晶度低、缓慢的电荷分离以及光吸收范围窄的问题，我们提出了结晶氮化碳的梯度掺杂[1]、面内缝补和层间裁剪[2]、激子解离[3-4]和介电屏蔽[5]等策略来加速电荷分离，通过缺陷修复[6]、n 型掺杂[7]、氧掺杂[8]、缺陷电离能调控[9]和原位构建体相缺陷策略[10]来扩展光吸收，最终实现了结晶氮化碳可见光及近红外光活性的调控。

参考文献

- [1] G. Zhang, Y. Xu, D. Yan et al., ACS Catal., 2021, 11, 6995-7005.
- [2] G. Zhang, J. Zhu, Y. Xu et al., ACS Catal., 2022, 12, 4648-4658.
- [3] G. Zhang, Y. Xu, J. Zhu et al., Appl. Catal. B-Environ., 2023, 338, 123049.
- [4] G. Zhang, Y. Xu, P. Zhang et al., Adv. Funct. Mater., 2024, 34, 2315116.
- [5] G. Zhang, Y. Xu, P. Zhang et al., ACS Nano, 2024, 18, 29294-29303.
- [6] G. Zhang, W. Huang, Y. Xu et al., Adv. Funct. Mater., 2023, 33, 2305935.

- [7] G. Zhang, Y. Xu, M. Rauf et al., Adv. Sci., 2022, 9, 2201677.
- [8] G. Zhang, Y. Xu, C. He et al., Appl. Catal. B-Environ., 2021, 283, 119636.
- [9] G. Zhang, X. Zhang, Y. Xu et al., Appl. Catal. B-Environ. Energy, 2024, 355, 124200.
- [10] H. Li, G. Zhang*, C. He et al., Appl. Catal. B-Environ. Energy, 2025, 365, 124910.

B01-41

基于二维光催化材料能带结构调控的基础探究

崔丹丹*

北京航空航天大学

光催化技术作为一种能够有效利用太阳能同时实现能源转换和环境净化的绿色技术，被认为是实现碳中和目标的重要途径之一。自 20 世纪初光催化技术被发现以来，其在能源转化、环境治理和化学合成等领域的应用潜力一直备受关注。然而，光催化效率低严重制约着该技术的发展。其中内量子效率表示参与反应的电子数与光催化剂实际吸收的光子数之比，反映了催化过程中光生载流子实际参与催化反应的能力，是衡量光催化剂性能的核心指标之一。因此，设计并制备具有高内量子效率的光催化剂是提高光催化效率、推动光催化技术实用化的关键。从光催化反应机理来看，量子效率与光生载流子（电子和空穴）的产生、分离、迁移、和复合等热力学和动力学过程密切相关。在光催化反应过程中，当载流子产生和分离效率确定时，载流子过低迁移速率或复合率过高都会导致载流子无法有效的参与光催化反应，其迁移和复合效率将直接影响能够有效迁移到材料表面并参与化学反应的载流子数量。载流子迁移率与能带弥散度相关：能带弥散度大，有效质量小，迁移率高；能带平坦则迁移率低。因此通过调控能带结构弥散度可优化载流子动力学行为，进而提升光催化性能。

B01-42

氮化碳基二维光催化剂设计及产氢性能

韩鑫*

华东理工大学

在“双碳”目标下，发展清洁的光催化分解水技术生产清洁的氢气具有重要意义。目前光解水产氢领域研究的热门材料之一是具有二维纳米结构的 $g-C_3N_4$ 。但是， $g-C_3N_4$ 光生电子与空穴易复合，限制了其光催化分解水产氢性能的提高，通常需要构筑异质结以及添加助催化剂等来改善其光生载流子的转移效率并为其提供高活性的产氢位点。因此，通过合理的结构设计来构筑性能优异的二维 $g-C_3N_4$ 基光催化剂尤为重要。

在这里，主要介绍我们针对二维纳米 $g-C_3N_4$ 光催化剂的结构特点，开发的一系列二维 $g-C_3N_4$ 基光催化材料，如以新型 MXene 材料为前驱体制备得到的性能优异的碳掺杂 $TiO_2/g-C_3N_4$ 异质结光催化剂；二维助催化剂（RuNi 合金、金属烯、单原子改性 MoS_2 等）负载的 2D/2D $g-C_3N_4$ 基高活性光催化剂；S 机制的 MOF/ $g-C_3N_4$ 异质结全解水光催化剂。基于以上研究，我们发现针对二维光催化剂的结构特点，开发能与其结构匹配的二维助催化剂来提升其性能是一种更为高效的方法。

B01-43

高效光催化体系的构建及其活性氧物种生成机制的研究

刘威*

南京大学现代工程与应用科学学院

随着工业化的不断发展，水污染问题日益严重，已经严重威胁人类的生产生活。相比传统的水污染治理方法，光催化技术绿色环保、无二次污染，可以降解有机污染物，从而实现水环境的修复。为了增强光催化在水污染中的应用，本报告以光催化降解中的几种主要的活性氧物种作为研究对象。通过构筑异质结、引入外场、元素掺杂和调控自旋-轨道耦合等方法来制备高效的光催化体系，并将其用于活性氧物种的产生。其中，这些活性氧物种主要包括超氧阴离子自由基（ $\cdot O_2^-$ ）、过氧化氢（ H_2O_2 ）、羟基自由基（ $\cdot OH$ ）和单线态氧（ 1O_2 ）。通过引入过渡金属硫化物来构筑压电辅助光催化体系，利用化学键和压电场来实现光生电子的直接传输，从而实现氧气活化产生 $\cdot O_2^-$ ；通过熔融盐处理来实现氮化碳的元素掺杂，并揭示氧气活化

产生 H_2O_2 的内在机制；通过引入单原子来增强钨酸铋活化 H_2O_2 产生 $\cdot\text{OH}$ 的性能；通过引入含氧官能团来提升氮化碳内部的自旋-轨道耦合来实现 $^1\text{O}_2$ 的高效产生。将催化剂的可控制备、先进的表征技术和密度泛函理论计算“三位一体”相结合，用于揭示活性氧物种的生成机理。将所获得的理论和依据与现实环境中亟待解决的水污染问题相结合，有助于推动光催化技术更好地满足国家和社会的重点发展需求。

B01-44

二维 In_2O_3 超薄片层限域 Cu 单原子协同氧空位实现 CO_2 高选择性光还原

杨月英*

山东省青岛市黄岛区前湾港路 579 号山东科技大学

温和条件下的光催化是将二氧化碳转化为高价值化学品的一种前景广阔的可持续方法，从而实现了高效的碳循环。然而，在提高光催化效率的同时又要获得单一产物仍然具有挑战性。在此，我们提出了一种在二维(2D)超薄片层(NSs)结构上进行温和阳离子交换的体相掺杂与双金属活性位点的协同效应工程，来促进 CO 的生产。以 $\text{Cu-In}_2\text{O}_3\text{-NSs}$ 光催化剂为例，该催化剂是通过简单室温下阳离子交换工艺将 Cu 单原子 (Cu SAs) 锚定 $\text{In}_2\text{O}_3\text{-NSs}$ 合成的。Cu SAs 与 In_2O_3 之间的强烈相互作用形成了电荷极化的 Cu/In 活性位点以及丰富的氧空位 (OV)。二维(2D)超薄片层(NSs)结构在促进二氧化碳富集和限制关键中间产物方面具有显著优势，从而提高了 $\cdot\text{COOH}$ 的覆盖率。 $\text{Cu-In}_2\text{O}_3\text{-NSs}$ 催化剂在全光谱光照下可实现 $17.24\mu\text{mol g}^{-1}\text{h}^{-1}$ 的 CO 产率和近乎统一的选择性 (>99%)，并且在长循环 64 小时内表现出良好稳定性。综合光谱表征和 DFT 理论计算揭示了 Cu/In 和 Ov 活性位点构建有利于 $\cdot\text{CO}_2$ 的吸附、 $\cdot\text{COOH}$ 的生成和解吸，并加速了光发电荷载流子在 $\text{In}_2\text{O}_3\text{-NSs}$ 和 Cu 单原子间的动态转移，从而提高了 CO_2 的光还原活性和 CO 的高选择性。这项工作为构建特定活性位点的光催化剂提供了一种新策略，为提高光催化还原 CO_2 的活性和选择性提供了新的见解。

B01-45

表面多重活性在光还原二氧化碳过程中的耦合适配性

陈辛夷*、陈虹宇

厦门大学

光还原二氧化碳 (CO_2) 是能源环境领域的前沿课题，借助太阳能将 CO_2 还原成各类有机原料和燃料，对促进化工领域内闭环达成“双碳”目标有着巨大潜力。但是， CO_2 还原是一个涉及多电子参与的多步反应过程，虽然脱氧和加氢等反应路径与电还原相似，但其激活和选择机理仍不完全清楚，致使其总体性能仍不足以满足实用需求，尤其是附加值和体能量密度更高的多碳产物的获得还需开启中间体耦合反应，需要精确调控活性位点能量特征和中间体动力学性质。

然而，受到材料固有热力学特性影响，制备过程中将不可避免地引入其它杂质和缺陷，成为额外活性位点，造成光催化剂表面活性多样化。不同活性位点对光生载流子的消耗存在竞争性，如不能有效优化或诱导协同，必将造成产物选择性低下，只有基于位点能量特征充分调控相邻位点的电子行为协同性，使相邻关键中间体获得耦合自发性和动力学驱动性，才有望高选择性获得多碳产物。

本研究深入研究了光催化剂各类活性位点的能量特征和关键中间体，包括掺杂、缺陷、共催化及复合结构等局域态和表界面态，厘清各个位点的能量特征及还原路径，选择性激活位点的特征还原路径，优化相邻中间体适配性，钝化副反应位点活性，使相邻中间体耦合具备热力学自发性和动力学驱动性。研究发现，位点电荷密度、表面电势起伏、相邻位点还原路径差异，都可能具备潜在的耦合适配性，通过光催化剂组分和电子结构调控，使相邻活性位点的能量特征、关键中间体、中间体稳定性等关键因素有利于开启耦合反应，从而提升多碳产物的生成选择性。

参考文献

- [1] Chen, H. Y.; Wang, L. H.; Long, D.; Chen, X. Y.* et al. *Appl. Catal. B* 2024, **357**: 124260.
- [2] Long, D.; Liu, J.; Chen, H. Y.; Chen, X. Y.* et al. *Appl. Catal. B* 2023, **330**: 122625.
- [3] Long, D.; Liu, J.; Bai, L.; Chen, X. Y.* et al. *ACS Photonics* 2020, **7**: 3394.

[4] Liu, P.; Chen, H. Y.; Zhao, C. Y.; Chen, X. Y.* et al. *Appl. Surf. Sci.* 2024, **659**: 159887.

[5] Chen, H. Y.; Zhao, C. Y.; Chen, X. Y.* *Chem. Asian. J.* [R] 2025: asia.202500106.

B01-46

原子级调控 Bi 基光催化剂结构及其光催化 CO₂ 还原性能研究

侯慧林*

宁波工程学院

化石燃料的过度消耗和燃烧所产生的二氧化碳 (CO₂) 不仅导致了全球能源危机, 还加剧了温室效应。为了实现“碳达峰”和“碳中和”战略目标, 并减少对不可再生能源的依赖, 发展绿色可持续能源势在必行。太阳能因其能量密度高、无环境污染、获取方便等优势, 被广泛认为是最具潜力的绿色能源之一。受到自然界光合作用的启发, 通过太阳能将 CO₂ 转化为高附加值的碳基化合物, 不仅能够实现碳资源的循环利用, 还能有效降低 CO₂ 浓度。在光催化 CO₂ 还原过程中, 光催化剂起着重要作用。尽管近年来已有多种光催化剂被应用于 CO₂ 还原性能的研究, 但其转换效率低、稳定性差、产物选择性低等问题仍未得到有效解决。基于上述问题, 本研究选择二维超薄 Bi 基材料作为研究对象。二维超薄材料具有比表面积大、表面不饱和和配位原子多、载流子传输距离短等优点, 因此在改性方面具有较大潜力。采用水热法制备了二维超薄 Bi₂WO₆ 和 BiOCl 纳米片, 并从原子层面对其结构进行优化与调控, 从而实现了高效的光催化 CO₂ 还原性能。

参考文献

[1] H. Hou, C.R. Bowen, D. Yang, W. Yang, *Chem*, 2024, 10, 800-831.

[2] H. Hou, G. Shao, W. Yang, W-Y. Wong, *Prog. Mater. Sci.* 2020, 113, 100671.

[3] H. Hou, L. Wang, F. Gao, G. Wei, B. Tang, W. Yang, T. Wu, *J. Am. Chem. Soc.* 2014, 136, 16716.

[4] H. Hou, X. Zeng, X. Zhang, *Angew. Chem., Int. Ed.* 2020, 59, 17356.

[5] K. Song, H. Hou, D. Zhang, F. He, W. Yang, *Appl. Catal. B-Eviromen.*, 2023, 330, 122630.

B01-47

基于可解释机器学习的钛基半导体带隙预测方法

袁斌霞*、杨深奥、刘宇豪、侯笑飞、汪立

上海电力大学

本研究旨在构建一种基于可解释机器学习的钛基半导体带隙预测方法, 以期对相关材料的筛选和优化提供理论支持。首先, 通过筛选 Materials Project 数据库中的钛基化合物, 并利用 Magpie 描述符提取元素特征, 再结合主成分分析对数据进行降维, 构建了一个具有代表性的样本数据集, 进一步利用 SHAP 方法揭示了电负性、共价半径、周期数及晶胞体积等关键特征提取, 通过对带隙的影响机制, 为理解材料内在属性与性能之间的关系提供了直观依据。随后, 采用随机森林回归模型对带隙进行预测, 并通过参数优化提高模型性能。研究结果显示, 该方法在钛基半导体带隙预测中表现出较高的准确性和良好的可解释性, 为光催化、太阳能电池等光电子器件领域的材料开发提供了有力的数据支撑和设计参考。

B01-48

近红外光响应性 MnO_x/Ag₃PO₄ 异质结用于快速根除胸骨骨折植入物感染

王轶凡、李朝阳*

天津大学

开放性植入手术中的细菌感染通常导致手术失败并使患者痛苦。本研究设计了一种近红外光响应性 MnO_x/Ag₃PO₄ 异质结用于快速根除胸骨骨折植入物感染。具体而言, 通过一步低温水热法及离子交换与静电吸附法, 分别在钛基底表面制备了 MnO_x 和 Ag₃PO₄ 涂层。值得注意的是, MnO_x/Ag₃PO₄ 异质界面中的内建电场有效促进了光生电子的迁移。在 808 nm 近红外光照射 15 分钟条件下, 该异质结可产生大量活性氧和局部热量 (约 53°C), 对金黄色葡萄球菌 (抗菌率 99.5%) 和大肠杆菌 (抗菌率 98.8%) 展现出显著抗菌效果。体内实验证实胸骨骨折植入物表面的复合涂层具有良好的生物安全性, 并能有效清除细菌感染。

该策略为开放性手术中光响应抗菌植入物的开发提供了新思路。

B01-49

钙钛矿基异质结的构筑及其在光催化有机合成领域的研究

钟杨菠、朱海波*

东华理工大学

钙钛矿于其独特的特性，特别是大消光系数、接近单位的光致发光量子产率、小激子结合能和浅陷阱态，使它们作为有机合成中的光催化剂具有吸引力。然而，这些材料作为潜在光催化剂的利用受到其热和湿度稳定性不足以及催化位点数量相对有限的严重阻碍，此外，光照射有可能引发某些晶格畸变，从而破坏钙钛矿的耐久性。解决这一问题的一种常用策略是开发“异质纳米结构材料”，例如，通过将光催化剂与金属、石墨烯或半导体混合，这产生了促进界面电荷转移和分离的内部电场。基于钙钛矿材料的异质结光催化系统的发展可以有效地提高电荷转移效率，促进高能电子和空穴进行氧化还原反应，从而提高光催化性能。因此，我们首先提出全固态 Z-型 $\text{CsPbBr}_3/\text{Au/g-C}_3\text{N}_4$ 纳米结的制备，其发生在伯、仲和叔苄基位置的氧化反应中表现出显著增强的光催化性能，作为固态电子介质的金属 Au 物种可以有效地加速光催化剂之间光生电子和空穴的转移速率。与此同时，Mxene 作为新型 2D 材料，相比于氮化碳 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ MXene 的层状性质和丰富的表面末端使其成为容纳第二材料构建异质结构的优异相容材料，已经报道了衍生自 MXene 的具有精确和良好形成界面的异质结构，并且通过限制效应实现了改善的电荷转移和抑制二次材料的团聚，这有利于提高它们的催化性能和稳定性。因此，我们通过热注射原位生长构筑 $\text{CsPbBr}_3/\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ 纳米复合材料，实现光催化硫醇类化合物快速($29700 \mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$)脱氢偶联。

B01-50

无铅卤化物钙钛矿 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 的改性及协同产 H_2O_2 研究

贾荣荣、吴健豪、蔡宇星、侯梦珊、李兰、金成超、陈智*

中国计量大学

开发高效稳定的光催化剂是光催化技术作为解决能源与环境问题的关键核心，无铅卤化物钙钛矿 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 因具有优异的光电性能，引起了广泛关注。然而，其水稳定性差等问题严重限制了其在实际水体中的应用。针对 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 存在的以上问题，本研究从功能性配体修饰、异质结构建及非结构性配体修饰三种策略入手,进行了相关研究。

首先，使用功能性配体 TCPP 成功修饰了 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 纳米片，拓展了材料的光响应范围，并有效阻隔绝水的侵蚀，最优配比的 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ -TCPP 光降解效果可达 84.04%，经四次循环后的降解效果仍能保持在原始样品的 93.12%以上，水稳定性得到了明显提升。其次，开发制备了一种 I 型异质结的 PCN-222/ $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 光催化材料，其最优配比 PC75 的降解效果为 82.05%，在实际自然光照 8 h 后降解效果高达 96.72%，此外其对实际养殖水体的 TC-HCl 降解效果可达 80.00%。最后，采用多种非结构性配体对上一实验中制备的 PC75 进行修饰，其中 NH_2 -BA 修饰后的催化剂光催化性能最优，展现出了优异的光催化生产 H_2O_2 和降解 TC-HCl 效果。值得注意的是，PC75- NH_2 催化剂可以在降解 TC-HCl 的同时能够协同高效生产 H_2O_2 达 $2478.33 \mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$ ，两个反应相辅相成，使载流子分离率提高，呈现出令人满意的协同光催化性能。本研究提出异质结构建和表面修饰优化策略，成功制备出性能优异、水稳定性良好的复合光催化剂，促进 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 在光催化生产 H_2O_2 和水体抗生素污染治理领域的进一步发展。

参考文献

- 1.Chen X., Chen Z*, et al., Journal of Colloid and Interface Science, 2025, 683 (2), 1049–1056.
- 2.Li C., Chen Z*, et al., Rare Metals, 2025, prepublsh: 01–11.
- 3.Wu J., Chen Z*, et al., Applied Catalysis A: General, 2024, 689, 120009.
- 4.Wu J., Chen Z*, et al., Journal of Environmental Sciences, 2024, 152, 577–583.
- 5.Li C., Chen Z*, et al., Ceramics International, 2024, 50 (21), 42127–42134.

B01-51

石墨相氮化碳的亚/超临界流体后处理改性及光催化产氢性能研究

师进文, 毛柳浩, 翟彬江, 康幸, 阳灿杭, 金辉, 郭烈锦

(西安交通大学绿色氢电全国重点实验室, 陕西 西安 710049)

摘要: 太阳能驱动的光催化分解水产氢技术有助于实现“碳中和”目标, 其中光催化分解水产氢体系的性能很大程度上取决于光催化剂。石墨相氮化碳 ($g-C_3N_4$) 是一种具有可见光响应的非金属光催化剂, 具有低成本和易于合成的优点, 受到广泛关注。然而, 热聚合法合成的 $g-C_3N_4$ 存在比表面积小, 光生载流子复合严重等问题, 制约了其用于光催化产氢的实际应用。为克服上述瓶颈, 开发一种高效、省时、高产率且具备规模化潜力的后处理策略对原始 $g-C_3N_4$ 进行结构调控, 是实现光催化产氢降本增效的重要路径。当流体温度和压力同时超过临界点时, 即成为“超临界流体”。亚/超临界流体因其独特的化学反应性、优异的传质与溶解能力, 被誉为“未来绿色溶剂”。基于亚/超临界流体的后处理策略, 有望为 $g-C_3N_4$ 的结构调控提供一种绿色、高效的途径。

本研究以热聚合法合成的原始 $g-C_3N_4$ 为改性对象, 分别采用亚临界水、超临界有机流体和超临界 CO_2 /改性剂体系对其进行改性处理, 通过提高升温速率并缩短保温时间, 有效避免了 $g-C_3N_4$ 结构的过度破坏, 同时提高了后处理效率。系统考察了不同亚/超临界流体的最优处理参数, 并设计流动式反应器, 实现了 $g-C_3N_4$ 的连续化处理改性。研究进一步揭示了不同亚/超临界流体处理环境中, $g-C_3N_4$ 的结构调控机制及其对光催化产氢活性提升的作用机理。依据流体自身的反应特性, 实现了 $g-C_3N_4$ 在表面和体相层面的多重结构调控, 包括形貌调控、官能团嫁接和异质结构构建等。这些结构调控结果有效拓宽了光吸收范围、促进了光生载流子的分离与迁移, 并增加了表面反应活性位点, 从而显著提升了改性 $g-C_3N_4$ 的可见光催化产氢活性。本研究建立了基于亚/超临界流体的 $g-C_3N_4$ 后处理改性策略, 具有有效、省时、高产率且可规模化的优势, 为高效低成本 $g-C_3N_4$ 基光催化剂的规模化制备提供了理论依据和实践参考。

关键词: 超临界流体; 氮化碳; 氢能; 结构调控; 太阳能

B01-52

金属 Ag 诱导 $ZnIn_2S_4$ 复合光催化剂的制备及其产氢性能研究

谭红琳*

昆明理工大学

氢能因其高热值、零碳排放和可持续性优势, 被视为解决能源危机与环境问题的理想载体。光催化制氢技术通过半导体材料实现太阳能向化学能的直接转化, 为构建清洁能源体系提供了重要路径。硫化铟锌 ($ZnIn_2S_4$, ZIS) 因其可调控的带隙结构和优异的可见光响应特性, 在光催化领域展现出巨大潜力, 但其实际应用仍受限于光生载流子快速复合、界面电荷传输效率低及表面催化位点反应动力学迟缓等瓶颈问题。金属银 (Ag) 作为多功能助催化剂, 其独特的局域表面等离子体共振 (LSPR) 效应与电子调控能力, 为同步优化光催化过程的“光子捕获-载流子分离-表面反应”全链条提供了解决方案。研究优化 AgNCs 尺寸, 实现 Ag@ZIS 光吸收增强, 使可见光产氢活性提升至 $1876.42 \mu\text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$; 采用 CVD 法将 PVP 石墨化构建 Ag@C@ZIS 界面电荷传输通道, 界面电荷传输效率提升使产氢活性进一步提高至 $3568.68 \mu\text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$; 基于 CNTs 载体优化 Ag 负载量构建 CNT@Ag@ZIS 异质结构, 在表面 H-S 键能调节机制下使产氢效率提升至 $18.44 \text{ mmol g}^{-1} \text{h}^{-1}$ 。三者分别从光吸收增强、界面传输优化及表面动力学调控三个维度提升 Ag-ZIS 体系光催化产氢性能。

B01-53

光催化纳米材料在抗菌治疗中的应用

于欣*

济南大学

细菌感染每年困扰着数百万人, 已成为一个全球严峻的公共卫生问题。与普通抗生素相比, 光催化材料抗菌剂具有以下两个优点: 1) 对革兰氏阳性菌和革兰氏阴性菌普遍具有杀灭作用; 2) 具有极高的稳定性从而对细菌的预防具有持久的作用效果。但是在体内抗菌治疗时, 光催化需要持续敞开光照; 而伤口必

须包扎与光照的矛盾难调和。目前虽然可以利用可见光增加其穿透深度进行光催化杀菌，但其效果一直不是很理想。而且，光催化过程中产生的 ROS 寿命极短，扩散半径有限，使其无法作用到细菌表面就会消失，也降低了杀菌效果。针对光催化材料在杀菌治疗中可见光效果差，材料对细菌的捕获能力不足及需要持续光照的问题，我们专注于将光催化材料应用到杀菌治疗中。首先，通过光催化机理研究，实现了近红外光响应的具有增强载流子分离能力的光催化性能；接着，通过纳米-生物表界面的调控，实现了材料对细菌的捕获，使产生的 ROS 能够迅速的作用到捕获细菌的表面，增强了杀菌能力；进一步，将光催化与酶催化结合起来，解决了杀菌需要持续光照的问题，实现了“白”加“黑”的治疗，为实际应用的推进提供了理论依据和技术支持。

B01-54

基于第一性原理计算的适配材料界面多样性的直接隧穿模型

叶歌宇，邹芳鑫

香港理工大学航空与民航工程学系

隧穿效应在量子力学中描述了粒子穿透高势垒的能力，是理解电催化过程中界面电荷转移的关键机制之一。为提升理论公式在真实电催化环境下的适用性，即针对描述多样化材料构成的复杂固液、固固异质结界面处的电子输运行为，本研究聚焦于电子直接隧穿过程，以讨论一定电子分布下的各电子隧穿概率的经典直接隧穿理论为基础，结合第一性原理计算，建立了一套新的适配异质界面材料多样性的隧穿电流模型体系。该模型创新性地引入与电极材料态密度分布相关的参数，考虑了两电极间电势差的影响，并讨论了两种可能的电压情况下的直接隧穿以更贴近实际情况应用。在物理性与数学性上，我们保证了推导内容与每个参数的物理意义，讨论了所涉及近似方法的合理性与适用性，并通过引入常数修正保留了与直接积分相当的准确性。该模型完善了直接隧穿理论在复杂电催化环境下的应用，为深入理解界面电荷转移以及设计具有优化界面电子结构的高效电催化剂提供了重要的理论进展和量化工具。

B01-55

释放氧化物基催化剂在 CO₂ 光氢化中的潜力：氧空位促进关键中间体的 C-O 键断裂

林哲苻*

南京大学

在 CO₂ 加氢反应中，通常认为氧空位主要对 CO₂ 吸附和活化步骤起着重要作用。然而，根据氧空位的结构与电子特性，以及 CO₂ 转化反应的连续性，氧空位对反应过程中一系列含氧中间体的作用可能长期被忽视和低估。本文以 CO₂ 光甲烷化为模型反应，利用富氧空位的 Co₃O₄ 来研究氧空位与含氧中间体形成、转化的关系。原位漫反射傅立叶变换红外光谱 (DRIFTS) 分析和密度泛函理论 (DFT) 计算结果表明，甲酸盐是反应过程的关键中间体，其 C-O 键断裂是 Co₃O₄ 表面甲烷化反应的限速步骤。而氧空位的存在可加速含甲酸盐在内的各含氧中间体的 C-O 键断裂及转化，进而实现较高的 CH₄ 生成速率 (1108.1 mmol g⁻¹ h⁻¹) 和选择性 (93%)。这项研究为进一步认识 CO₂ 转化反应中氧空位的多重作用提供了一定的见解，为后续设计和开发高性能 CO₂ 转化催化剂提供了实验支撑。

B01-56

高熵设计促进质子化石墨相氮化碳的光催化产氢性能

臧云珠*

山东科技大学材料科学与工程学院

摘要：在应对当前能源危机的可行方案中，光催化分解水产氢 (H₂) 因其能将太阳能转化为可存储化学能的特点而备受关注。本研究通过静电自组装法将 FeCoNiCuPt 高熵合金纳米颗粒 (HEA NPs) 负载于质子化石墨相氮化碳纳米片 (HCN NSs) 表面，构建 HEA/HCN 复合材料。质子化处理不仅为 g-C₃N₄ 纳米片表面富集了丰富的活性位点，还显著提升了界面电荷分离能力。优化后的 HEA/HCN 复合材料表现出 1367 μmol·h⁻¹g⁻¹ 的优异产氢速率，较原始 HCN 提升达 113.91 倍，其在 λ=370 nm 处的表观量子效率达到 3.23%。实验表征表明：二维超薄质子化 g-C₃N₄ 纳米片具有高比表面积和缩短的电荷转移路径，可促进光生电子的

快速迁移；而 HEA 助催化剂的引入不仅提供额外活性位点，更在 HEA/HCN 界面形成肖特基结。二者的协同效应有效加速电子传输并抑制光生载流子复合，从而显著提升光催化产氢性能。该工作为高熵合金作为新型助催化剂在光催化领域的应用提供了新思路。

墙报

B01-P01

A general strategy for the enhanced H₂ production performance of CdS/noble metal sulfide nanorods photocatalysts by cation exchange

Shanna An*

Shandong University of Science and Technology

In this work, we report a series of noble metal (Ag, Au, Pt, etc.) sulfides that act as co-catalysts anchoring on CdS nanorods (NRs) obtained via a cation exchange strategy to promote photocatalytic hydrogen evolution. CdS NRs are first generated via a hydrothermal routine, noble metal sulfides are then in-situ grown on CdS NRs by a cation exchange method. CdS/Ag₂S, CdS/Au₂S and CdS/PtS NRs show improved hydrogen production rates (2506.88, 1513.17 and 1004.54 $\mu\text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$, respectively), approximately 18, 11 and 7 times higher than CdS NRs (138.27 $\mu\text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$). Among CdS/noble metal sulfide NRs, CdS/Ag₂S NRs present the best H₂ production performance. The apparent quantum efficiency (AQE) of CdS/Ag₂S NRs achieves 3.11 % at $\lambda = 370$ nm. The improved photocatalytic performance of CdS/noble metal sulfide NRs dues to the following points: i) Noble metal sulfides on CdS NRs are beneficial for elevating light-absorbing and light-utilizing capacities, contributing to generating more photoexcited charges; ii) Noble metal sulfides are in-situ grown on CdS NRs as electron acceptors by a cation exchange method, thus the photoexcited electrons generated by CdS NRs rapidly migrate to the surface of noble metal sulfides, successfully accelerating the carriers separation efficiency. This series of noble metal sulfides acting as co-catalysts anchoring on CdS NRs offer new insights into the construction principles of high-performance photocatalytic hydrogen evolution catalysts.

B01-P02

无需外部能量输入的持续光热 CO₂甲烷化

杜凯、李亚光*

河北大学

本研究设计并制备了一种由 NiO 与 CeO₂构成的二维固溶体催化剂(2D Ni₁Ce₁O₃),用于实现低温 CO₂甲烷化,并开发了不依赖外部能量输入的自驱动光热催化系统。通过引入爆炸合成法快速制备出高分散、无相分离的 Ni-Ce 固溶体催化剂,其具有片状纳米结构和较大的比表面积(110 m²/g)。X 射线吸收谱(XAS)和 EXAFS 分析表明, Ni 替位进入 CeO₂晶格,诱导了氧空位的产生,有利于 CO₂的活化和中间体稳定。

该催化剂在 300 °C 下实现了高达 2124.5 mmol g⁻¹ h⁻¹ 的 CH₄生成速率, CH₄选择性达 99.5%,性能显著优于传统 Ni/CeO₂和 Ni/Al₂O₃催化剂。理论计算揭示,其反应路径由 CO 中间体氢化主导,而非直接碳氢化反应,具有更低的反应能垒(0.915 eV),且表现出对 CO 的强吸附能力,从而提高了 CH₄选择性。在光热装置方面,研究构建了基于 TiC/Cu 的光热转换器,在弱光照(0.2 sun)下即可实现甲烷化起始反应,强光(1 sun)下甲烷生成速率高达 2901 mmol g⁻¹ h⁻¹。在无光条件下,该系统仍可依赖 CO₂甲烷化反应放热维持催化剂温度在约 340 °C,持续稳定产气 84 小时, CH₄生成速率维持在~830 mmol h⁻¹。

在实际户外验证中,系统在连续 5 天(包括多云与夜晚)运行中累计生产 CH₄约 898 m³,并同时回收超过 10 吨热水,验证了其全天候自驱动能力。经济评估表明,在现有原料成本下系统已接近平衡,未来有望通过氢气成本下降实现盈利。本工作开发了一种高活性、高选择性的二维 Ni-Ce 固溶体催化剂,并结合 TiC/Cu 光热结构,首次实现了在无外部能源输入下持续运转的光热 CO₂甲烷化反应。该研究不仅拓展

了低温 CO₂转化技术的应用边界，也为实现碳中和提供了高效、绿色的新路径，具有广阔的工业化前景。

B01-P03

铈掺杂对 CuBi₂O₄ 光阴极表面钝化及水解离的促进作用

胡颖飞*、薛扬

金陵科技学院

本研究聚焦于通过太阳能和半导体光电极实现光解水制氢，以助力可持续能源未来。四方相铋酸铜（CuBi₂O₄）作为一种极具潜力的光阴极材料，其带隙为 1.6-1.8 eV，但受限于其体相电荷传输差、表面复合严重以及水还原动力学缓慢等问题。为解决这些问题，本研究通过金属有机分解法在 CuBi₂O₄ 薄膜中引入铈（Sr），并利用多种表征技术揭示了 Sr 的作用。研究发现，Sr 在 CuBi₂O₄ 表面以 SrCO₃ 形式自发分离，能够钝化表面缺陷，抑制表面复合并促进体相电荷分离；同时，表面 Sr 物种还能促进水的解离，加速光阴极上的水还原反应。此外，Sr 在 Bi 晶格位点上的掺杂也增加了 CuBi₂O₄ 的载流子密度。因此，与未掺杂的 CuBi₂O₄ 相比，掺杂 Sr 的 CuBi₂O₄ 光阴极的起始电位正移了 80 mV，且在 0.3 VRHE 时光电流增加了 81.3%。本研究不仅提供了一种简单有效的策略，可同时解决 CuBi₂O₄ 光阴极中载流子传输和反应动力学问题，还为未来设计更高效的光电极以构建无偏压光解水装置提供了新思路。

B01-P04

C₃N₄/C₃N₅/FeOOH 水凝胶膜中微区反应增强光芬顿降解四环素能力

江晟皓¹、王辉虎*¹、韦晨慧楠¹、赵云¹、王倩玉¹、向兴¹、曾磊²

1. 湖北工业大学

2. 武汉工程大学

四环素类抗生素在水环境中的持续积累对全球生态系统构成严重威胁。传统光催化剂降解四环素技术中，催化剂分散在水体中易造成回收困难和二次污染风险。水凝胶载体因其具有催化剂固定能力和微区反应的特点，为解决上述问题提供了新思路。本研究基于海藻酸钠水凝胶为载体，通过吸附共沉淀的方法构建了 C₃N₄/C₃N₅/FeOOH 水凝胶膜催化体系。该体系的三维多孔结构不仅实现了催化活性位点的微区分布，有效提高了反应效率，同时抑制了催化剂的流失。进一步进行光电测试，揭示了复合体系中载流子的高效分离与传输机制，阐明了其催化性能提升的内在原因。通过淬灭实验和表征相结合揭示其降解机理。此外，通过对降解中间体进行分析，阐明 TC 降解途径，得出其整体降解过程向低毒方向降解。本研究为发展高效、稳定的光催化-芬顿协同降解技术提供了新策略，在抗生素污染控制领域具有潜在应用价值。

B01-P05

Methyl radical dominated highly selective methane oxidation to liquid oxygenates

Jingwen Jiang, Jianyong Feng, Zhaosheng Li*

Nanjing University

Selective oxygenation of methane to value-added chemicals remains a great challenge, due to the higher oxidation tendency of products than inert methane that leads to uncontrollable overoxidation. Herein, a strategy of photo-induced direct generation of methyl radicals ($\bullet\text{CH}_3$) from methane is proposed, as contrast to the traditional reaction mechanisms relying on highly oxidative activators (such as $\bullet\text{OH}$ radicals), via which the methane oxygenation process could occur in a controllable manner and overoxidation of formed products to CO₂ is properly avoided. To this end, Pt single atom-decorated ZnO (Pt₁/ZnO) is assembled as the proof-of-concept photocatalyst, in which Pt single atoms serve as both hole trapping and methane activation sites; the yielded $\bullet\text{CH}_3$ with enriched surface coverage then drives the radical chain process by first incorporating the environmentally benign molecular oxygen (or its derivative $\bullet\text{O}_2^-$), and gives a remarkable liquid product selectivity and formaldehyde yield of 95% and 2.98 mmol g⁻¹ h⁻¹ with a record quantum efficiency of 14.14% at 350 nm.

B01-P06

晶格氧在光催化气-固相反应中的作用：参与者与主导者

李中华、李朝升*

南京大学现代工程与应用科学学院

晶格氧活化已成为优化基于氧化物的热催化和电催化活性和选择性的一种可行策略。然而，晶格氧在氧化物光催化剂中的作用一直被忽视，特别是在气-固相反应中。这里，以 $\text{Ru}_1@\text{ZnO}$ 单原子光催化剂氧化甲烷为原型反应，通过 ^{18}O 同位素标记技术揭示了晶格氧可以直接参与光催化气-固反应。并且，通过估算初始阶段的动力学常数，确定晶格氧在光催化反应中起主导作用。此外，发现即使在没有目标反应物的情况下，晶格氧与 O_2 分子之间的光驱动扩散仍可以发生。最后，单原子 Ru 可以促进吸附 O_2 的活化和被消耗的晶格氧的再生，从而确保催化剂的高活性和高稳定性。该研究结果对新一代具有更高活性和选择性的氧化物光催化剂具有指导意义。

B01-P07

原位构建垂直型 $\text{TiO}_2/\text{MXene}$ 肖特基异质结以增强细菌捕获，实现光热和光动力协同的抗菌效果

马蓉、饶绍盛、刘芹芹、杨娟*

江苏大学材料学院

全球约有 30% 的人口仍无法获得安全的饮用水，而每年由水传播疾病导致的死亡人数达 200 万。与传统的水消毒方法（如臭氧、卤化剂和紫外线）相比，基于太阳能的光催化技术是一种绿色的消毒技术。尽管光催化水消毒能够避免二次污染以及传统方法所存在的其他缺陷，但其整体性能往往受到诸如电荷分离效率低下和细菌捕获受限等挑战的限制。在此，通过一步水热法成功合成了垂直型 $\text{TiO}_2/\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x\text{-MXene}$ ($\text{v-TiO}_2/\text{MXene}$) 肖特基异质结，以实现高效的电荷分离和转移，并增强细菌捕获能力。与传统的颗粒型 $\text{TiO}_2/\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x\text{-MXene}$ ($\text{p-TiO}_2/\text{MXene}$) 相比，垂直排列的 v-TiO_2 结构提供了更多的细菌捕获位点，显著增强了细菌的吸附和相互作用。此外， $\text{v-TiO}_2/\text{MXene}$ 比 $\text{p-TiO}_2/\text{MXene}$ 具有更强的内建电场 (IEF)，有效地促进了电荷载流子和热电子的分离和迁移。理论计算表明， $\text{v-TiO}_2/\text{MXene}$ 增强了对氧气和水分子的吸附和活化，从而显著增加了活性氧物质 (ROS) 的生成。因此， $\text{v-TiO}_2/\text{MXene}$ 在模拟阳光照射下对耐甲氧西林金黄色葡萄球菌 (MRSA)、金黄色葡萄球菌 (*S. aureus*) 和大肠杆菌 (*E. coli*) 的抗菌效率高达 99.7%，这一数值比 $\text{p-TiO}_2/\text{MXene}$ 高出 1.42 倍。本研究为高性能抗菌应用的光催化剂结构设计提供了有价值的见解。

B01-P08

Efficient photothermal catalysis of dry reforming of methane over $\text{Ni/MgAl}_2\text{O}_4$: a full-spectrum solar utilization strategy

Lingxin Meng*

Shandong University of Science and Technology, No.579 Qianwan Harbour Road, Xin'an Street, Huangdao District, Qingdao, Shandong Province, China

Dry reforming of methane (DRM) is an effective way to convert two greenhouse gases into fuels. However, high energy consumption and catalyst deactivation and catalyst deactivation restrict its development. Here, $\text{Ni/MgAl}_2\text{O}_4$ and $\text{Ni/Al}_2\text{O}_3$ were prepared for thermal catalytic and photothermal catalytic DRM, and their reaction mechanisms were explored. $1\text{Ni/MgAl}_2\text{O}_4$ exhibits excellent thermal catalytic activity and stability, while $1\text{Ni/Al}_2\text{O}_3$ gradually deactivates after the initial 6 h of stability due to the coating of Ni nanoparticles with Al_2O_3 . In-situ DRIFTS confirmed that $1\text{Ni/MgAl}_2\text{O}_4$ and $1\text{Ni/Al}_2\text{O}_3$ followed reaction mechanisms of E-R and L-H, respectively. In addition, under focused UV-VIS-IR irradiation, extremely high fuel yield value (91.18 and 100.80 $\text{mmol g}^{-1} \text{min}^{-1}$ for p_{H_2} and p_{CO}) and excellent stability (60 h) achieved. The outstanding performance of photothermal catalytic DRM stems from the photo-driven thermal catalytic DRM brought about by efficient photothermal conversion and the performance improvement resulting from the reduction of reaction activation

energy by light irradiation.

B01-P09

光驱动 C-N 偶联合成甲胺类盐酸盐的机制探究

裴欣雅、宋辉*、叶金花

天津大学

传统工业路线合成甲胺类盐酸盐需高温高压（300 ℃）及多步骤复杂工艺。本研究提出光驱动甲醇与氯化铵直接 C-N 偶联新策略，在温和条件下 4 小时内实现 29.62 mmol g⁻¹ 的高产率。实验和理论计算结合表明，甲醇经过光催化氧化生成甲醛。随后，NH₄⁺ 与生成的甲醛发生亲核反应并逐步甲基化，从而实现多种 C-N 产物的合成。其中，表面氧空位增强甲醇吸附，Pd 纳米粒子促进电子转移，从而协同降低反应活化能。光激发起着双重催化作用，促进了热力学上具有挑战性的甲醇到甲醛的转化，并使在黑暗中被抑制的逐步甲基化步骤成为可能。这项工作强调了金属助催化剂、氧空位和光生载体在构建 C-N 偶联途径中的协同作用，为 C₁ 资源高值化利用提供了一种可持续的方法。

B01-P10

Morphology-Controlled Al-Doped SrTiO₃ Photocatalyst for Boosting Photocatalytic Overall Water Splitting

Chenhe Wu, Jinhua Ye, Lequan Liu*

Tianjin university

One-step photocatalytic overall water splitting (POWS) is a promising route for solar-to-hydrogen conversion. Al-doped strontium titanate (STO:Al) has emerged as a promising photocatalyst, yet the precise control over its morphology and anisotropic facet exposure for efficient POWS remains a critical challenge. In this study, a controlled doping approach was developed for the precise morphological engineering of STO:Al photocatalysts. Controlled particle size optimization leads to markedly enhanced light-harvesting capability, while precisely engineered (110) facet exposure promotes efficient bulk charge separation. The optimized photocatalyst achieves a remarkable solar-to-hydrogen efficiency of 0.66% under natural sunlight irradiation, representing one of the highest reported values for SrTiO₃-based systems. These findings offer significant insights into the structure-activity relationships, providing important guidance for the development of highly efficient photocatalysts.

B01-P11

自然光驱动绿色合成气生产

吴琦璇、李亚光*

河北大学

众多的 CO₂ 资源化范式中，以光电催化为代表的人工光合作用能够将 CO₂ 和水转化为化学品，是实现“双碳”战略的重要途径。目前大面积人工光合作用的太阳光使用规模~1 平方米，太阳能-化学能转化效率~12%。进一步扩大人工光合作用系统规模和提升其太阳能-化学能转化效率对于人类社会的可持续发展至关重要。前期工作中，李亚光博士与孟庆波研究员联合提出了光热 CO₂ 加氢-光电催化分解水耦合的新型人工光合作用系统这一设想。在此基础上，本工作开发了 NiO-Ag 光热催化剂，使得该系统能够在低密度太阳光辐照下运行；该工作以 "A Ni-O-Ag photothermal catalyst enables 103-m² artificial photosynthesis with >17% solar-to-chemical energy conversion efficiency" 为题发表在 Science Advances (Sci. Adv., 2024, 10, eadn5098,). 申请人团队依据光热-光电耦合模式开发了光照面积 103 平方米的人工光合作用室外示范。在该系统中，光伏电解水产生的氢气直接注入光热系统进行光热 CO₂ 加氢。该系统在室外太阳光辐照下连续 4 天保持稳定运行，能够将 CO₂ 和 H₂O 定向转换为 CO、CH₄ 等 C₁ 物质，其产量达到~22m³/天，平均太阳能-化学能转换效率为~17.0%，这项工作表明光热-光电耦合机制为人工光合作用的规模化、高效化打下了坚实的基础。

B01-P12**In situ growth of cobalt phthalocyanine on gas diffusion electrodes by covalent grafting enables CO₂ reduction at ampere-level current density**

Huihui Yan, Jianyong Feng, Zhaosheng Li*

Nanjing University

Achieving stable immobilization of cobalt phthalocyanine (CoPc) molecular catalysts without compromising their intrinsic activity, while enabling their integration into industrially viable electrocatalytic systems, remains a critical challenge in CO₂ electrolysis. Here, we address this challenge through an in situ electrochemical covalent grafting strategy that directly anchors CoPc onto gas diffusion electrodes at room temperature using pyrrole as a conductive linker. This approach establishes robust δ -bonding interactions between polypyrrole and CoPc, which not only prevents catalyst aggregation and detachment but also modulates the electronic structure of CoPc via electron donation from the ppy matrix to the Co center. The resulting molecular catalyst, when configured into a membrane electrode assembly electrolyzer, delivers exceptional CO₂-to-CO conversion performance in alkaline media, sustaining industrially relevant current densities of 1 A cm⁻² for 50 hours and 500 mA cm⁻² for 120 hours. Furthermore, coupling this electrolyzer with a photovoltaic system achieves a record solar-to-fuel efficiency of 19.2%, which is unparalleled among molecular catalyst-based electrolyzers. By reducing the longstanding trade-off between stability and activity through atomic-scale covalent engineering, this work reveals the potential applications of molecular catalysts in the development of high-performance devices, providing a new direction for technological advancement.

B01-P13**Femtosecond Pump-Probe-Spectra in the Heptazine-H₂O Complex: A Computational Study**SEBASTIAN VIKTOR PIOS¹, MAXIM F. GELIN², WOLFGANG DOMCKE³, LIPENG CHEN 陈立朋*¹

1. 之江实验室

2. 杭州电子科技大学

3. Technical University Munich / 慕尼黑工业大学

Polymeric carbon-nitrides have emerged as promising candidates for sustainable water splitting using solar photons. Its building block heptazine (Hz) has been subjected to various experimental and theoretical studies, investigating its electronic structure and photochemistry when exposed to water. While the mechanism has been unraveled, the ultra-fast spectroscopic features are still elusive with experimental and theoretical results lacking. In this study we use the Hz-H₂O complex as a model and the isolated Hz monomer as a reference system to simulate its nonadiabatic excited-state molecular dynamics using the state-of-the-art wavefunction method ADC(2). Employing the classical formulation of the doorway-window representation we were able to predict the ground-state bleach (GSB), stimulated emission (SE) and excited state absorption (ESA) contributions to the transient absorption (TA) and two-dimensional (2D) electronic spectra. The results show the features of the ultrafast non-radiative decay of the photoexcited system, with a branching of the wavepacket after about 30 fs. The subsequent population transfer to low-lying excited states is slowed down marginally by the presence of the water molecule. The overlap of spectroscopic features for the reactive charge-transfer state in the ESA contribution with the GSB contribution, proves the importance of theoretical support when investigating TA pump-probe and 2D electronic spectra.

B01-P14

萤石氧化锆上光热甲酸分解制备高纯一氧化碳

刘邦, 李亚光*

河北大学

本研究提出了一种无需分离纯化步骤即可高效制备高纯度一氧化碳 (CO) 的方法, 利用光热驱动的甲酸脱水反应, 并开发出纯净的萤石型二氧化锆 (fluorite ZrO_2) 作为关键催化剂。通过第一性原理计算发现, 萤石型 $\text{ZrO}_2(111)$ 晶面能显著抑制甲酸脱氢副反应 (生成 H_2), 从而实现 100%选择性的甲酸脱水生成 CO。理论分析揭示, 该晶面上的饱和配位表面氧原子具有负电势且碱性弱, 能够排斥 HCOO^- 等负性中间体的吸附与转化, 彻底切断了 H_2 生成路径。

实验方面, 研究团队采用爆炸法合成出高纯度的萤石型 ZrO_2 纳米片, 其在 $250\text{ }^\circ\text{C}$ 下可实现 CO 产率高达 $55\text{ mmol g}^{-1}\text{h}^{-1}$, 且完全无 H_2 生成, CO 选择性达 100%。该催化剂在连续反应超过 80 小时后仍保持稳定性能, 并具优异的结构稳定性。原位红外光谱 (DRIFTS) 进一步证实, 反应过程中仅存在 COOH 脱水中间体, 未观察到 HCOO 信号, 验证了理论预测的中间体排斥机制。

在能源系统方面, 研究构建了 TiC/Cu 为基底的光热反应器, 将 F- ZrO_2 与自然光集成, 实现了无需二次能源供给的纯 CO 生产。在 0.5 sun (0.5 kW m^{-2}) 光照下, CO 生成速率提升至 $83\text{ mmol g}^{-1}\text{h}^{-1}$, 太阳能到化学能转化效率达 12.3%, 超过美国能源部提出的 10% 目标。在户外实验中, 该系统每天可产出 $1,538\text{ L m}^{-2}$ 的纯 CO, 材料投入-产出利润约为 18,714 美元/每平方米/每年。

本研究不仅提出了一种绿色、低成本、可扩展的高纯度 CO 生产策略, 还提供了通过表面配位结构调控副反应生成的普适性催化设计思路, 为高纯气体产业提供了重要的技术突破。

仅发表论文

B01-PO01

活性位点调控光热催化二氧化碳高附加值转化

宁尚波*, 叶金花

河北大学

以太阳能驱动的光热催化结合了光化学和热化学作用的特点, 已成为解决能源与环境问题最有前景的新技术之一, 而这一技术应用的关键仍是高性能催化材料的开发。针对 CO_2 还原过程中存在的反应分子靶向活化难、催化活性低和产物选择性差等问题, 设计多元组分的协同催化体系, 有望为太阳能到化学能的高效转化提供一种新思路[1-5]。通过原位光热活化构筑 $\text{Co}^0\text{-Co}^{\delta+}$ 结构, 作为 C1 中间体的 C-C 耦合的协同催化活性位点。实验和理论计算结果证实了界面双活性位点实现有效吸附、活化 CO_2 , 通过 Co^0 位点生成 C1 中间体, 而引入 $\text{Co}^{\delta+}$ 的缺电子态能有效降低关键 CHCH^* 中间体的反应能, 从而促进 C_2+ 低碳烯烃的生成。利用 Cu 修饰 CoFe 合金催化剂, 成功实现逆水煤气变换和费托合成串联反应, 从而实现光驱动 CO_2 加氢制备高选择性低碳烯烃 (C_2H_4 、 C_3H_6 和 C_4H_8)。在流动式单反应器中, 太阳光驱动 CO_2 加氢合成低碳烯烃 $\text{C}_2\text{-4}$ 选择性达 56%。以上研究提供了光热催化剂设计应用于光还原 CO_2 转化为 C_2+ 高附加值的新思路。

参考文献

- [1] S. Ning, H. Ou, D. Wang,* J. Ye* et al. Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 135, e202302253.
- [2] S. Ning*, J. Wang, X. Wu, J. Ye* et al. Adv. Funct. Mater., 2024, 34, 2400798
- [3] S. Ning, H. Xu, S. Ouyang,* J. Ye et al., ACS Catal., 2020, 10, 4726-4736.
- [4] X. Wu, S. Ning*, J. Ye* et al., Chem. Sci., 2025, 16, 4568-4594.
- [5] H. Ou, S. Ning, J. Ye,* D. Wang, Y. Li* et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 134, e202206579.